

UNIVERSITE DE MONTPELLIER

FACULTE DES SCIENCES

T H E S E

présentée à la Faculté des Sciences de Montpellier
pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences Physiques

CONTRIBUTION A L'ETUDE THÉORIQUE ET EXPÉRIMENTALE
DES BANDES D'ENERGIE ELECTRONIQUE
DANS L'ANTIMONIURE DE GALLIUM

par

Guy BORDURE

Soutenue le 6 Mars 1969 devant la Commission d'Examen.

Jury :	MM. M. SAVELLI,	Président
	B. PISTOULET,	Assesseur
	PH. NOZIERES,	} Invités
	M. HULIN,	



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41551917_0019

UNIVERSITE DE MONTPELLIER

FACULTE DES SCIENCES

T H E S E

présentée à la Faculté des Sciences de Montpellier
pour obtenir le grade de Docteur ès Sciences Physiques

CONTRIBUTION A L'ETUDE THÉORIQUE ET EXPÉRIMENTALE
DES BANDES D'ENERGIE ELECTRONIQUE
DANS L'ANTIMONIURE DE GALLIUM

par

Guy BORDURE

Soutenue le 6 Mars 1969 devant la Commission d'Examen.

Jury :	MM. M. SAVELLI,	Président
	B. PISTOULET,	Assesseur
	PH. NOZIERES,	}
	M. HULIN,	

UNIVERSITEIT DE BRUXELLES

LIBRAIRIE DE LA FACULTE

1881

Le Directeur de la Librairie de la Faculté
se trouve à l'adresse suivante :
M. J. VAN DER STAMPEL

CONSTITUTION & CÉLÈBRE HISTOIRE ET APPRENTISSAGE
DES SAUVAGES ÉTENDUS ÉLÉMENTAIRE
DANS L'ÉTENDUE DE LA LITTÉRATURE



Le Directeur de la Librairie de la Faculté

Le Directeur de la Librairie de la Faculté
se trouve à l'adresse suivante :
M. J. VAN DER STAMPEL

Doyen A. CASADEVALL

Délégué au Conseil de l'Université Ch. SAUVAGE
Premier Assesseur

Délégué au Conseil de l'Université P. DUMONTET
Deuxième Assesseur

Directeur du Collège Scientifique Universitaire de PERPIGNAN ...J. RABINOVITCH

Directeur de l' I. P. E. S. M. MAURIN

Chef des Services Administratifs E. SIAU

Doyen honoraire: P. MATHIAS

Professeurs honoraires:

R. JACQUES	J. SOULA
M. CASTERAS	G. DENISOT
E. CARRIERE	J. GRANIER
E. TURRIERE	Ch. BOUHET

Professeurs titulaires:

M. M. MOUSSERON	Chimie Organique
M. J.P. ROIG	Physique
M. P. CHATELAIN	Minéralogie & Cristallographie
Mlle O. TUZET	Zoologie
M. G. COUCHET	Mécanique Supérieure
M. J. SALVINIEN	Chimie-Physique
Mlle A.M. VERGNOUX	Physique
M. J. AVIAS	Géologie
M. P. VIELES	Chimie
M. J. RABINOVITCH	Physique (C.S.U. P.)
M. E. KAHANE	Chimie Biologique
M. J.J. MOREAU	Mécanique Rationnelle
M. B. CHARLES	Mathématiques pures
M. J. MOTTE	Biologie Végétale
M. R. JOUTY	Physique
M. P. DUMONTET	Physique
M. R. LEGENDRE	Zoologie
M. I. ASSENMACHER	Physiologie Animale
M. A. CASADEVALL	Chimie Organique
M. B. PISTOULET	Physique
M. Ch. ROUMIEU	Analyse Supérieure

M.	J. ROBIN	Physique
M.	A. POTIER	Laboratoire des Acides Minéraux
M.	R. LAFONT	Physique
M.	R. JACQUIER	Chimie
M.	J. FALGUEIRETTES	Minéralogie
M.	J. REGNIER	Chimie
Mme	J. CHARLES	Mathématiques
M.	P. CAILLON	Physique
M.	J. ROUZAUD	Chimie
M.	Ch. SAUVAGE	Botanique
M.	H. CHRISTOL	Chimie (E. N. S. I.)
Mme	G. VERNET	Biologie Animale
M.	L. CECCHI	Physique
M.	H. ANDRILLAT	Astronomie
M.	M. SAVELLI	Physique
M.	M. MATTAUER	Géologie
M.	L. EUZET	Zoologie (C. S. U. P.)
M.	C. DELOUPY	Physique
M.	L. GRAMBAST	Botanique

Professeurs sans chaire

Mme	M.L. POUQUES	Botanique (C. S. U. P.)
M.	P. MURAOUR	Géophysique Appliquée
M.	G. TOURNE	Chimie
M.	J. REMY	Géologie
M.	P. DEMANGEON	Géologie
M.	A. BONNET	Botanique
Mme	S. ROBIN	Physique
Mme	Ch. DUBOUL-RAZAVET	Géologie (C. S. U. P.)
M.	E. GROUBERT	Physique

Mme	H. GUASTALLA	Biologie Physico - Chimique
M.	G. LAMATY	Chimie
M.	F. PROUST	Géologie
Mle	A. BAILLETTE	Mathématiques (C. S. U. P.)
M.	A. BASSOMPIERRE	Physique
M.	R. MARTY	Psychophysiologie
M.	M. MAURIN	Chimie
M.	N. ROBY	Mathématiques
Mme	N. PARIS	Physiologie Végétale

Professeurs Associés

M.	E. AKUTOWICZ	Mathématiques
M.	A. MICALI	Mathématiques
M.	C. VAGO	Biologie Animale
M.	K. KOHLER	Biochimie
M.	C. QUATE	Physique
M.	Y. CORMARY	Géologie

Maîtres de Conférences

M.	D. DULL	Chimie
M.	R. GAUFRES	Chimie
M.	J. J. SOULIER	Chimie (C. S. U. P.)
M.	J. PARIS	Zoologie
M.	P. MOLINO	Mathématiques
M.	G. BOUGNOT	Physique
M.	Y. GUITTON	Physiologie Végétale (C. S. U. P.)
M.	G. BOMBRE	Physique (C. S. U. P.)
M.	C. PUISSEGUR	Biologie Animale (C. S. U. P.)
M.	P. VIALLET	Chimie (C. S. U. P.)

M.	L. THALER		Géologie
M.	J. LEGRAND		Physiologie Animale
M.	M. ROUZEYRE		Physique
M.	P. SABATIER		Mathématiques
M.	Ch. CASTAING		Mathématiques
M.	J.P. FILLARD		Physique
Mme	M. HAKIM		Mathématiques
M.	R. HAKIM		Mathématiques

Chargés d'Enseignement

M.	M. LEFRANC		Mathématiques
Mle	Ch. BARBANCE		Mathématiques (C. S. U. P.)

A mes parents,

A ma femme et à mes fils,

A tous les miens.

Ce travail a été effectué au Centre d'Etudes d'Electronique des Solides de la Faculté des Sciences de Montpellier sous la direction de Monsieur le Professeur M. SAVELLI . Grâce aux conseils qu'il m'a donnés et à la confiance qu'il m'a accordée, j'ai pu réaliser ce travail. Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de ma profonde gratitude.

Monsieur le Professeur Ph. NOZIERES m'a fait le grand honneur de bien vouloir s'intéresser à ce travail et de participer au jury de cette thèse. Je le prie d'agréer mes sincères remerciements.

Je suis très reconnaissant à Monsieur le Professeur B. PISTOULET et à Monsieur le Professeur M. HULIN d'avoir bien voulu participer à mon jury de thèse.

Mes remerciements s'adressent également à Monsieur le Professeur J. FALGUEIRETTES pour l'excellent accueil qu'il m'a réservé au Centre de Calcul de la Faculté des Sciences de Montpellier. Je remercie Monsieur B. FILLIATRE de l'aide qu'il m'a apportée pour l'utilisation de l'ordinateur.

J'adresserai enfin mes remerciements à mes camarades de laboratoire qui m'ont aidé efficacement dans la partie expérimentale de ce travail.

Mademoiselle F. GUANTER a bien voulu se charger de la dactylographie de ce mémoire. Je lui sais gré du grand soin qu'elle a apporté à cette tâche délicate et d'avoir accepter un surcroît de travail.

Chapitre I

I N T R O D U C T I O N

Ce travail a été effectué dans le cadre d'une étude concertée des propriétés de l'antimoniure de gallium faite au Centre d'Etudes d'Electronique des Solides de la Faculté des Sciences de Montpellier. Son but est de préciser la structure de bande de ce composé et plus particulièrement celle de la bande de conduction.

A l'époque où cette étude a été entreprise, aucun résultat théorique sur la structure de bande du Ga Sb n'était disponible. La structure de bande de ce composé n'était pas pour autant totalement ignorée. Il existe en effet une relation étroite entre la structure de bande des composés III.V tel le Ga Sb et celle des composés IV.IV tel le germanium dont les études théoriques étaient très avancées. Ces composés ont en effet des structures cristalline et électronique voisines, leurs réseaux sont identiques ainsi que leurs mailles élémentaires. Les cristaux des composés IV.IV possèdent un centre de symétrie supplémentaire. La théorie des groupes permet de relier les deux structures de bande puisque le groupe de symétrie du Ga Sb est un sous-groupe du groupe des symétries du Ge. Ainsi l'interprétation des résultats expérimentaux était-elle guidée par cette analogie.

Il m'a donc semblé intéressant, d'une part de réaliser un calcul théorique de la structure de bande du Ga Sb (1ère partie) et d'autre part de faire une étude expérimentale de la bande de conduction (2ème partie).

Pour effectuer le calcul de bande, de nombreuses méthodes étaient disponibles. Parmi celles-ci, la méthode O.P.W. (méthode des ondes planes orthogonales) avait donné de bons résultats pour le germanium et semblait donc intéressante, cependant la liaison dans le Ga Sb présente un certain degré d'ionicté et la méthode de Kohn-Rostoker est spécialement bien adaptée aux liaisons ioniques. Cette dernière méthode nécessite un formalisme mathématique plus complexe que la méthode O.P.W., mais la pratique du calcul demande des moyens moins importants. L'étude théorique directe a donc été faite en utilisant la méthode de Kohn-Rostoker et les résultats ont été décevants : la structure de bande du Ga Sb était celle d'un métal. Fallait-il mettre en cause la validité de la méthode dans ce cas précis? La difficulté majeure des méthodes de calcul de bande réside en fait dans le choix du potentiel cristallin. La détermination exacte de ce potentiel est extrêmement difficile, aussi, au lieu de raffiner le modèle de potentiel cristallin, ai-je utilisé une méthode semi-empirique basée sur un calcul de perturbation à partir du modèle choisi. Cette méthode introduit deux paramètres ajustables. Les résultats sont en bon accord avec les valeurs expérimentales et les résultats obtenus récemment en utilisant la méthode O.P.W. d'une manière semi-empirique. Cette étude est exposée dans la première partie de ce travail.

Dans la deuxième partie, je me suis plus spécialement intéressé à l'étude expérimentale de la bande de conduction. L'étude est basée sur la rotation Faraday. Cet effet est très intéressant pour la détermination des masses effectives. Cependant la présence de deux minima très voisins rend délicate l'interprétation des résultats.

L'étude du deuxième minimum a nécessité, outre la mesure d'effet Hall complémentaire à la mesure de la rotation Faraday pour la détermination des masses effectives, des mesures de réflectivité infrarouge.

PREMIERE PARTIE

ETUDE THEORIQUE DE LA STRUCTURE DE BANDE

DE L'ANTIMONIURE DE GALLIUM

Le formalisme de la méthode de Kohn et Rostoker est exposé dans le chapitre II. Le chapitre III examine les conditions générales imposées par les symétries du cristal. Ces résultats sont fondamentaux dans une étude de ce type.

Les chapitres IV, V, VI sont consacrés d'une part au choix du potentiel cristallin et d'autre part à la préparation du calcul sur machine.

Dans le chapitre VII, je présente l'ensemble des résultats obtenus et les compare aux valeurs expérimentales ainsi qu'aux résultats obtenus avec l'aide d'autres méthodes de calcul.

Chapitre II

GENERALITES SUR LA METHODE DE KOHN - ROSTOKER

Dans ce chapitre, j'expose l'essentiel de la méthode développée par W. Kohn et N. Rostoker [1], B. Segall [2]; méthode qui permet, après avoir fait un choix du potentiel $V(\vec{r})$, de déterminer les niveaux d'énergie électroniques du cristal.

II.1 - PRINCIPE DE LA METHODE

Soit à résoudre l'équation de Schrödinger *

$$[-\Delta + V(\vec{r})] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (II.1.1)$$

* J'utilise comme système d'unités le système atomique dans lequel l'unité de longueur est le rayon de Bohr r_B et l'énergie le Rydberg

$$r_B = \frac{\hbar^2}{m_0 e^2} = 0,52917 \text{ \AA}$$

$$1 \text{ Rydberg} = \frac{e^2}{2 r_B} = 13,6049 \text{ eV}$$

Le potentiel $V(\vec{r})$ possède les symétries du cristal. Il est notamment invariant par les translations $\vec{R}_n$,

$$\vec{R}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (n_1, n_2, n_3 \text{ entiers}) \quad (\text{II.1.2})$$

($\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ sont les trois vecteurs de base du réseau direct,) c'est-à-dire

$$V(\vec{r} + \vec{R}_n) = V(\vec{r}) \quad (\text{II.1.3})$$

Les fonctions de Bloch $\Psi(\vec{r})$, solutions de (II.1.1), satisfont la relation

$$\Psi_k(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \Psi_k(\vec{r}) \quad (\text{II.1.4})$$

où $\vec{k}$ est un vecteur de la première zone de Brillouin.

L'équation (II.1.1), si la fonction Ψ satisfait la relation (II.1.4), peut se mettre sous la forme équivalente

$$\Psi_k(\vec{r}) = \int_{\tau} G_k(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_k(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{II.1.5})$$

l'intégration se faisant dans une maille élémentaire de volume τ .

La fonction de Green $G_k(\vec{r}, \vec{r}')$ est solution de l'équation

$$(\Delta + E)G_k(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{II.1.6})$$

et possède les propriétés suivantes

$$\left. \begin{aligned} G_k(\vec{r} + \vec{R}_n, \vec{r}') &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} G_k(\vec{r}, \vec{r}') \\ G_k(\vec{r}, \vec{r}') &= G_k^*(\vec{r}', \vec{r}) \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.1.7})$$

La fonction $G_k(\vec{r}, \vec{r}')$ peut s'écrire suivant le développement:

$$G_k(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{\epsilon} \sum_{\vec{K}_n} \frac{e^{i(\vec{k} + \vec{K}_n) \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{E - (\vec{k} + \vec{K}_n)^2} \quad (II.1.8)$$

où $\vec{K}_n$ est un vecteur du réseau réciproque.

Le principe variationnel, équivalent à l'équation (II.1.5), proposé par W. Kohn et N. Rostoker, est

$$\delta \Lambda = 0 \quad (II.1.9)$$

avec

$$\Lambda = \int_{\tau} \psi_k^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi_k(\vec{r}) d\vec{r} - \int_{\tau} \int_{\tau} \psi_k^*(\vec{r}) V(\vec{r}) G_k(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' \quad (II.1.10)$$

En développant $\psi_k(\vec{r})$ suivant un système de fonctions d'essai $\varphi_i(\vec{r})$ (on supprime désormais l'indice k)

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (II.1.11)$$

la fonction Λ s'écrit

$$\Lambda = \sum_{i,j} c_i^* \Lambda_{ij} c_j \quad (II.1.12)$$

avec

$$\Lambda_{ij} = \int_{\tau} \varphi_i^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) d\vec{r} - \int_{\tau} \int_{\tau} \varphi_i^*(\vec{r}) V(\vec{r}) G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' \quad (II.1.13)$$

La condition (II.1.9) conduit au système linéaire homogène

$$\sum_j \Lambda_{ij} c_j = 0 \quad (II.1.14)$$

qui admet une solution non banale si

$$\det [\Lambda_{ij}] = 0 \quad (II.1.15)$$

Puisque, pour des fonctions d'essai φ_i données, les Λ_{ij} ne dépendent que de $\vec{k}$ et de E , l'équation (II.1.15) permet d'obtenir la relation de dispersion $E = E(\vec{k})$. La résolution de (II.1.14) permet de déterminer les coefficients C_j , donc d'atteindre les fonctions propres.

II.2 - UTILISATION PRATIQUE DE LA METHODE

II.2.1 - Hypothèse d'un potentiel et conséquences

D'une manière générale, les intégrales contenues dans Λ_{ij} sont difficiles à évaluer pour un potentiel quelconque.

La méthode peut être utilisée pratiquement lorsque l'on choisit un potentiel de la forme

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} V_i(|\vec{r} - \vec{a}_i|) & \text{pour } |\vec{r} - \vec{a}_i| \leq \rho_i \\ V_M = \text{constante partout ailleurs} \end{cases} \quad (II.2.1)$$

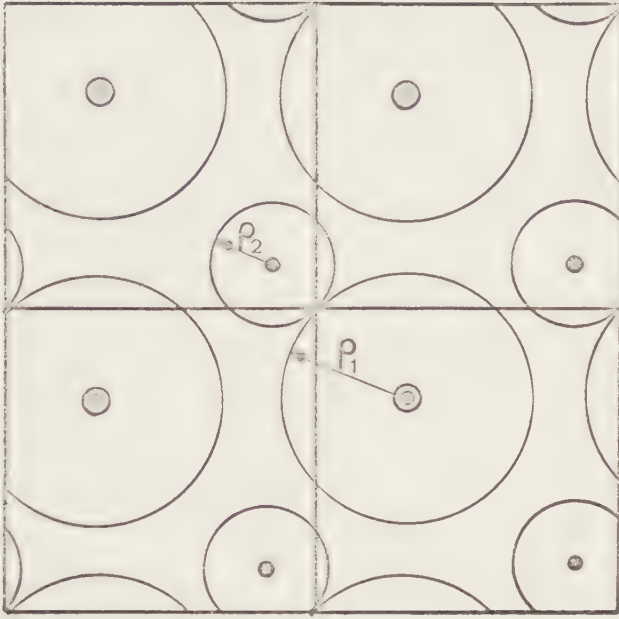


Fig: II.1

p_i est le rayon d'une sphère entourant l'atome i , et il n'y a pas de recouvrement entre les différentes sphères centrées sur les différents atomes (fig.II.1)

En choisissant le zéro des énergies de telle sorte que $V_M = 0$, l'évaluation des intégrales se fait en se limitant au domaine intérieur aux sphères atomiques.

D'autre part, le potentiel $V(\vec{r})$ choisi possédant la symétrie sphérique autour de chaque atome et à l'intérieur de

chaque sphère atomique, il est possible, autour de chaque atome i , de développer la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ suivant les harmoniques sphériques Y_{lm} (normés)

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{lm} C_{lm}^{(i)} R^{(i)}(|\vec{r} - \vec{a}_i|) Y_{lm}(\vec{r} - \vec{a}_i) \quad (II.2.2)$$

$$|\vec{r} - \vec{a}_i| \leq p_i$$

$R^{(i)}$ est la solution régulière à l'origine de l'équation radiale

$$\left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V_i(r) - E \right] R^{(i)}(r) = 0 \quad (II.2.3)$$

avec

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}; m > 0 \quad (II.2.4)$$

et $Y_{l-m} = (-1)^m Y_{lm}^*$

La fonction d'onde, dans la sphère atomique j , est de la forme

$$\psi(\vec{r}) = \psi^j(\vec{r}_j) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^{+l} C_{lm}^j R_l^j(r_j) Y_{lm}(\vec{r}_j) \quad (11.2.5)$$

avec $\vec{r}_j = \vec{r} - \vec{a}_j$

Pour tenir compte de la singularité de la fonction de Green pour $r=r'$, on choisit comme domaine d'intégration des sphères de rayons $\rho_j - \epsilon$ et $\rho_j + 2\epsilon$, alors

$$\Lambda = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \Lambda_\epsilon = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_j \int_{r_j < \rho_j - 2\epsilon} d\vec{r}_j \psi_j^*(\vec{r}_j) \nabla_j(\vec{r}_j) \times$$

$$\left\{ \psi(\vec{r}) - \sum_{j'} \int_{r_{j'} < \rho_{j'} - \epsilon} d\vec{r}_{j'} G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla_{j'}(\vec{r}_{j'}) \psi_{j'}(\vec{r}_{j'}) \right\} \quad (11.2.6)$$

En utilisant la formule de Green

$$\int (\phi \Delta \psi - \psi \Delta \phi) dV = \int \left(\phi \frac{\partial \psi}{\partial n} - \psi \frac{\partial \phi}{\partial n} \right) dS \quad (11.2.7)$$

(où $\frac{\partial}{\partial n}$ est la dérivée normale sur la surface considérée), on obtient:

$$\psi(\vec{r}) - \sum_{j'} \int_{r_{j'} < \rho_{j'} - \epsilon} G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla_{j'}(\vec{r}_{j'}) \psi_{j'}(\vec{r}_{j'}) d\vec{r}_{j'} =$$

$$\psi(\vec{r}) - \sum_{j'} \int G(\vec{r}, \vec{r}') (\Delta' + E) \psi_{j'}(\vec{r}_{j'}) d\vec{r}_{j'} =$$

$$\psi(\vec{r}) - \sum_{j'} \int_{r_{j'} = \rho_{j'} - \epsilon} dS' \left\{ G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \psi(\vec{r}_{j'})}{\partial n} - \psi(\vec{r}_{j'}) \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial n} \right\} -$$

$$\sum_{j'} \int d\vec{r}_{j'} \psi(\vec{r}_{j'}) (\Delta' + E) G(\vec{r}, \vec{r}')$$

or $(\Delta + E) G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$, aussi la dernière intégrale est égale à $\psi(\vec{r})$, et Λ_ϵ prend la forme:

$$\Lambda_\epsilon = \sum_j \int_{r_j < \rho_j - 2\epsilon} d\vec{r}_j \psi_j^*(\vec{r}_j) V_j(\vec{r}_j) \left[- \sum_{j'} \int_{r_{j'} = \rho_{j'} - \epsilon} dS' \left\{ G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \psi(\vec{r}_{j'})}{\partial n} - \psi(\vec{r}_{j'}) \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial n} \right\} \right] \quad (11.2.8)$$

En utilisant le même théorème de Green pour la première intégrale, Λ_ϵ devient:

$$\Lambda_\epsilon = \sum_j \int_{r_j = \rho_j - \epsilon} dS \left\{ \psi^*(\vec{r}_j) \frac{\partial}{\partial n} - \frac{\partial}{\partial n} \psi^*(\vec{r}_j) \times \sum_{j'} \int_{r_{j'} = \rho_{j'} - 2\epsilon} dS' \left\{ G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\partial \psi(\vec{r}_{j'})}{\partial n'} - \psi(\vec{r}_{j'}) \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}')}{\partial n'} \right\} \right\} \quad (11.2.9)$$

Pour développer Λ_ϵ on développe $G(\vec{r}, \vec{r}')$ en harmoniques sphériques [1], [2]:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = G^{jj'}(\vec{r}_j, \vec{r}_{j'}) = \sum_l \sum_{l'm'} \left\{ A_{lm, l'm'}^{jj'} j_l(\kappa r_j) j_{l'}(\kappa r_{j'}) + \right. \quad (11.2.10)$$

$$\left. \kappa \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} j_l(\kappa r_j) \eta_{l'}(\kappa r_j) \right\} Y_{lm}(\vec{r}_j) Y_{l'm'}^*(\vec{r}_{j'})$$

Relation qui est valable si $r_j < r_{j'}$ et si $(r_j + r_{j'}) < |\vec{a}_j - \vec{a}_{j'}|$ et où

$$\kappa = \sqrt{E} \quad \text{si} \quad E > 0$$

$$\kappa = i\sqrt{-E} \quad \text{si} \quad E < 0$$

Les coefficients $A_{lm, l'm'}^{jj'}$ sont caractéristiques de la structure du cristal.

$j_l(x)$ et $\eta_l(x)$ sont les fonctions de Bessel et de Newmann sphériques [3].

$$i_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+\frac{1}{2}}(x)$$

$$\eta_l(x) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{-l-\frac{1}{2}}(x) \quad (11.2.11)$$

Si dans l'équation (11.2.9) on remplace ψ et $G(\vec{r}, \vec{r}')$ par leurs développements en harmoniques sphériques, et si l'on fait tendre ϵ vers 0, on obtient grâce aux propriétés d'orthogonalité des Y_{lm} :

$$\Lambda = \sum_{jj'} \rho_j^2 \rho_{j'}^2 \sum_{lm} \sum_{l'm'} C_{lm}^{jj*} C_{l'm'}^{jj'} \Lambda_{lm, l'm'}^{jj'} \quad (11.2.12)$$

avec

$$\begin{aligned} \Lambda_{lm, l'm'}^{jj'} &= A_{lm, l'm'}^{jj'} \left[j_l'(\kappa r_j) R_l^j(r_j) - j_l(\kappa r_j) R_l^{j'}(r_j) \right]_{r_j = \rho_j} \times \\ &\quad \left[i_{l'}(\kappa r_{j'}) R_{l'}^{j'}(r_{j'}) - j_{l'}(\kappa r_{j'}) R_{l'}^{jj'}(r_{j'}) \right]_{r_{j'} = \rho_{j'}} \\ &\quad + \kappa \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \left[j_l' R_l^j - j_l R_l^{jj'} \right] \left[\eta_l R_l^{jj'} - \eta_l' R_l^j \right]_{r_j = \rho_j} \end{aligned}$$

Le principe variationnel conduit au système

$$\rho_j^2 \sum_{l', m', j'} \Lambda_{lm, l'm'}^{jj'} \rho_{j'}^2 C_{l'm'}^{jj'} = 0 \quad (11.2.13)$$

qui admet une solution non banale lorsque

$$\det \left[\Lambda_{lm, l'm'}^{jj'} \rho_{j'}^2 \right] = 0 \quad (11.2.14)$$

En divisant chaque ligne du déterminant par $\rho_{j'}^2 [j_{l'}' R_{l'}^{jj'} - j_{l'} R_{l'}^{jj'}]_{r=\rho_{j'}}$ et chaque colonne par $[i_{l'}' R_{l'}^j - i_{l'} R_{l'}^j]_{r=\rho_j}$ on obtient

$$\det \left[A_{l m_i l' m'}^{i i'} + \kappa \delta_{l l'} \delta_{j j'} \delta_{m m'} \frac{\eta_l^i(\kappa r) - \eta_l(\kappa r) L_l^j(r)}{j_l^i(\kappa r) - j_l(\kappa r) L_l^j(r)} \right]_{r=r_j} = 0 \quad (II.2.15)$$

avec

$$L_l^i(r) = \frac{R_l^{i'}(r)}{R_l^i(r)}$$

$L_l^i(r)$ est la dérivée logarithmique de la fonction d'onde radiale $R_l^i(r)$ sur la sphère j .

L'équation (II.2.15) permet de déterminer tous les niveaux d'énergie correspondant à un vecteur d'onde $\vec{k}$.

II.2.2 - Intérêt de l'utilisation des symétries

Il faut cependant remarquer que, en limitant le développement de $\Psi(\vec{r})$ à $l = 2$, le déterminant (II.2.15) est d'ordre 9 s'il y a un atome dans la cellule de base; il sera d'ordre 18 dans le cas du Ga Sb qui possède deux atomes par maille.

L'utilisation de la théorie des groupes permet d'une part, de diminuer considérablement l'ordre du déterminant, d'autre part de fixer le problème sur un type de niveau donné.

En effet, une fonction d'onde appartenant à une représentation irréductible S du groupe du cristal peut se développer suivant

$$\Psi^S(\vec{r}_i) = \sum_{l \mu} C_{l \mu}^{i(s)} R_l^i(r_i) y_{l \mu}^s(\vec{r}_j) \quad (II.2.16)$$

où $y_{l \mu}^s$ est une fonction de base de la représentation irréductible s du groupe ponctuel local. $y_{l \mu}^s$ s'exprime sous la forme d'une combinaison linéaire d'harmoniques sphériques de même l .

$$y_{l\mu}^s = \sum_m \alpha_{lm;\mu}^s y_{lm} \quad (II.2.17)$$

L'équation séculaire obtenue en utilisant le développement (II.2.16) est

$$\det \left[B_{l\mu, l'\mu'}^{jj'} + \kappa \delta_{jj'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \frac{\eta_l'(kr) - \eta_l(kr) L_l^j}{j_l'(kr) - j_l(kr) L_l^j} \right]_{r=p_j} = 0 \quad (II.2.18)$$

Dans laquelle les coefficients $B_{l\mu, l'\mu'}^{jj'}$ sont donnés par

$$B_{l\mu, l'\mu'}^{jj'} = \sum_{m, m'} \alpha_{lm;\mu}^{s(j)*} A_{lm, l'm'}^{jj'} \alpha_{l'm';\mu'}^{s'(j')} \quad (II.2.19)$$

Il est possible en effet que la fonction d'onde autour des atomes j et j' n'appartienne pas à la même représentation irréductible du groupe local.

II.3 - CONCLUSION

Ainsi, la méthode que j'ai employée pour calculer la structure de bande du Ga Sb consiste

- 1°- à examiner les symétries de ce cristal pour connaître les représentations irréductibles associées à chaque niveau ainsi que leurs fonctions d'essais (chapitre III)
- 2°- à calculer les coefficients de structure $B_{l\mu, l'\mu'}^{ii'}$ (chapitre IV)
- 3°- à choisir un modèle de potentiel afin de déterminer les dérivées logarithmiques $L_l^i(r)$ de la fonction d'onde radiale $R_l^i(r)$ sur les sphères atomiques (chapitre V).
- 4°- à calculer les zéros du déterminant (II.2.18) pour chaque représentation irréductible, et pour différents vecteurs d'onde $\vec{k}$ de la zone de Brillouin, ce qui permet d'obtenir la relation de dispersion $E(\vec{k})$ cherchée (chapitre VI).

Chapitre III

ELEMENTS DE SYMETRIE DE L'ANTIMONIURE DE GALLIUM

III.1 - STRUCTURE, RESEAUX DIRECT ET RECIPROQUE

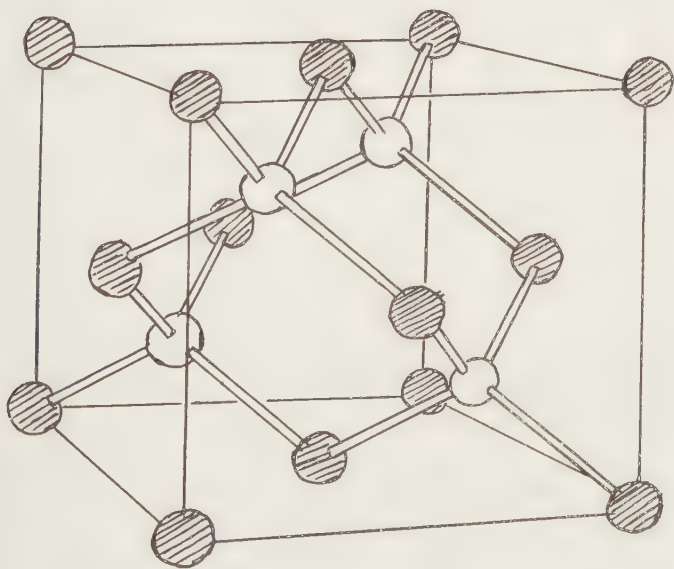


Figure III.1

Le réseau direct, du type cubique face centrée, est composé de deux sous-réseaux monoatomiques du type cubique face centrée décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale du cube (fig. III.1)

Si a_o est la constante du réseau et si $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ sont les trois vecteurs unitaires d'un repère orthogonal, les trois vecteurs de base du réseau direct sont

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{a_o}{2} (\vec{i} + \vec{j}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a_o}{2} (\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a_o}{2} (\vec{j} + \vec{k})\end{aligned}\quad (\text{III.1.1})$$

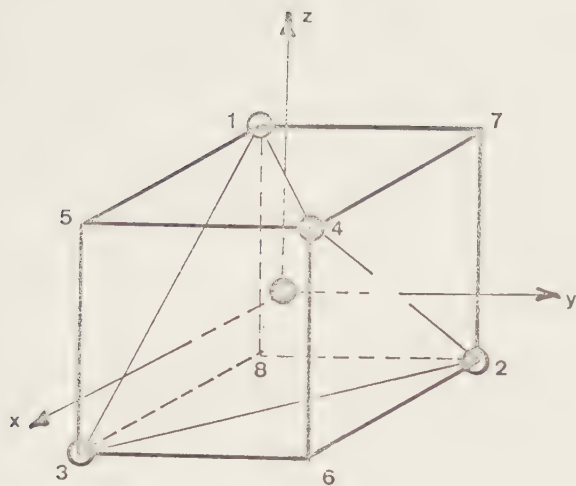


Fig:III.2

La constante a_o observée à 25°C est [4]
 $a_o = 6,09612 \text{ \AA}$.

La maille élémentaire du cristal comporte un atome de gallium et un atome d'anti-moine séparés par $d = 2,645 \text{ \AA}$.

Chaque atome de Ga possède un environnement tétraédrique composé d'atomes de Sb et réciproquement (fig.III.2).

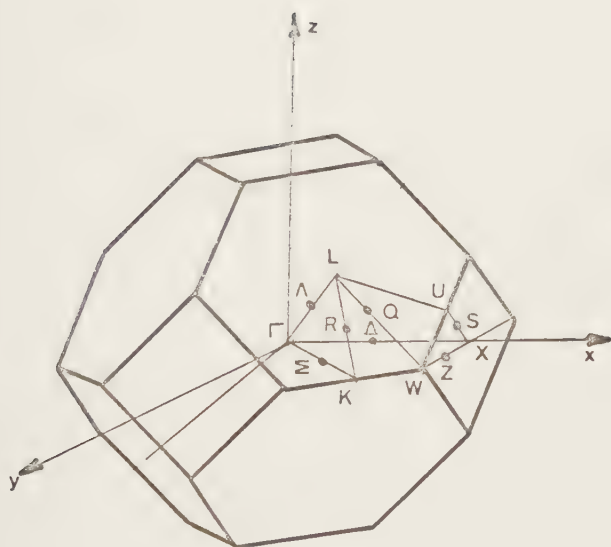


Fig:III.3

Le réseau réciproque est un réseau cubique centré dont les trois vecteurs de base sont

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a_o} (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a_o} (\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \quad (\text{III.1.2})$$

$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a_o} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$

La première zone de Brillouin est un octaèdre tronqué représenté sur la figure III.3. La dénomination des points de haute symétrie est celle utilisée par G.F.Koster [5].

III.2 - GROUPE SPATIAL DE SYMETRIE

Le groupe spatial de l'antimoniure de gallium est un groupe symmorphique: toute opération du groupe est une opération du groupe ponctuel (groupe facteur) associée à une translation primitive du réseau.

Le groupe ponctuel associé est le groupe T_d dont je rappelle les différents éléments de symétrie, en utilisant les notations de Seitz, soit:

δ_{2i} ($i = x, y, z$) Rotation d'ordre 2 autour des axes $0x, 0y, 0z$,

$\delta_{3s}, \delta_{3s}^{-1}$ ($s = x y z, \bar{x} y z, x \bar{y} z, x y \bar{z}$) Rotation de $\pm \frac{\pi}{3}$ autour des diagonales du cube,

σ_{4i} ($i = x, y, z$) Rotation de $\frac{\pi}{4}$ autour des axes $0x, 0y, 0z$ suivie d'une inversion (équivalent à une rotation suivie d'une symétrie),

ρ_p ($p = xy, yz, zx, \bar{x}y, \bar{y}z, \bar{z}x$) Rotation de $\frac{\pi}{2}$ autour d'axes bis-sectant deux axes de coordonnées suivie d'une inversion (équivalent à une symétrie par rapport au plan perpendiculaire).

Le tableau III.1 énumère les différentes opérations du groupe ponctuel associé au groupe spatial. Les 24 opérations y sont rangées en 5 classes et est indiquée leur action sur un point courant de coordonnées $x y z$.

	classe	opération S	$S^{-1}(r)$
1	E	$(E, 0)$	$x y z$
2	C_4^2	$(\delta_{2z, 0})$	$\bar{x} \bar{y} z$
3		$(\delta_{2x, 0})$	$x \bar{y} \bar{z}$
4		$(\delta_{2y, 0})$	$\bar{x} y \bar{z}$
5	JC_4	$(\sigma_{4z, 0}^{-1})$	$y \bar{x} \bar{z}$
6		$(\sigma_{4z, 0})$	$\bar{y} x \bar{z}$
7		$(\sigma_{4x, 0}^{-1})$	$\bar{x} z \bar{y}$
8		$(\sigma_{4x, 0})$	$\bar{x} z \bar{y}$
9		$(\sigma_{4y, 0}^{-1})$	$\bar{z} \bar{y} x$
10		$(\sigma_{4y, 0})$	$z \bar{y} \bar{x}$
11	JC_2	$(p_{xy, 0})$	$\bar{y} \bar{x} z$
12		$(p_{xz, 0})$	$\bar{z} y \bar{x}$
13		$(p_{yz, 0})$	$x \bar{z} \bar{y}$
14		$(p_{x\bar{y}, 0})$	$y x z$
15		$(p_{x\bar{z}, 0})$	$z y x$
16		$(p_{y\bar{z}, 0})$	$x z y$
17	C_3	$(\delta_{3xyz, 0}^{-1})$	$z x y$
18		$(\delta_{3xyz, 0})$	$y z x$
19		$(\delta_{3x\bar{y}z, 0}^{-1})$	$z \bar{x} \bar{y}$
20		$(\delta_{3x\bar{y}z, 0})$	$\bar{y} \bar{z} x$
21		$(\delta_{3x\bar{y}\bar{z}, 0}^{-1})$	$\bar{z} \bar{x} y$
22		$(\delta_{3x\bar{y}\bar{z}, 0})$	$\bar{y} z \bar{x}$
23		$(\delta_{3xy\bar{z}, 0}^{-1})$	$\bar{z} x \bar{y}$
24		$(\delta_{3xy\bar{z}, 0})$	$y \bar{z} \bar{x}$

Tableau III.1

III.3 - REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU GROUPE (SIMPLE) DU VECTEUR $\vec{k}$

A un vecteur $\vec{k}$ du réseau réciproque, on associe le sous-groupe g^k du groupe du cristal qui laisse invariant $\vec{k}$ ou le transforme en un vecteur équivalent qui se déduit de $\vec{k}$ par une translation primitive du réseau réciproque. Les caractères χ des représentations irréductibles des g^k aux différents points remarquables de la zone de Brillouin sont fondamentaux, aussi sont-ils rappelés ci-dessous. Les notations utilisées sont celles de G.F. Koster [5].

	E	$8C_3$	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2$
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1	-1
Γ_{12}	2	-1	2	0	0
Γ_{15}	3	0	-1	1	-1
Γ_{25}	3	0	-1	-1	1

Point Γ (groupe T_d)

	E	σ_{2x}	ρ_{yz}	ρ_{yz}
Δ_1	1	1	1	1
Δ_3	1	-1	1	-1
Δ_2	1	1	-1	-1
Δ_4	1	-1	-1	1

Point Δ (groupe C_{2v})

Δ_3 et Δ_4 sont couplés par le renversement du temps

	E	σ_{2x}	$\sigma_{4x} \sigma_{4x}^{-1}$	$\sigma_{2y} \sigma_{2z}$	$\rho_{yz} \rho_{yz}^{-}$
X_1	1	1	1	1	1
X_4	1	1	1	-1	-1
X_2	1	1	-1	1	-1
X_3	1	1	-1	-1	1
X_5	2	-2	0	0	0

Point X (groupe D_{2d})

	E	σ_{2y}
Z_1	1	1
Z_2	1	-1

Point Z (groupe C_2)

	E	ρ_{xy}
$K \begin{smallmatrix} E & R \\ 1 & 1 \end{smallmatrix}$	1	1
$K \begin{smallmatrix} E & R \\ 2 & 2 \end{smallmatrix}$	1	-1

Points K, E, R (groupe C_{1h})

	E	σ_{4y}	σ_{2y}	σ_{4y}^{-1}
W_1	1	1	1	1
W_3	1	-1	1	-1
W_4	1	i	-1	-i
W_2	1	-i	-1	i

Point W (groupe S_4)

W_2 et W_4 sont couplés par le renversement du temps

	E	ρ_{xz}
S_1	1	1
S_2	1	-1

Point S (groupe C_{1h})

	E	$\sigma_{3x\bar{y}z}^{-1}$ $\sigma_{3x\bar{y}z}$	$\rho_{x\bar{y}}$
$L_1 \Lambda_1$	1	1	1
$L_2 \Lambda_2$	1	1	-1
$L_3 \Lambda_3$	2	-1	0

Points L, Λ (groupe C_{3v})

III.4 - EFFET DU RENVERSEMENT DU TEMPS

L'opérateur renversement du temps, K , est un opérateur antiunitaire qui vérifie les règles de commutations suivantes: $K \vec{r} K^+ = \vec{r}$ et $K \vec{p} K^+ = -\vec{p}$.

Supposons que nous ayons un ensemble de n fonctions propres dégénérées appartenant à une représentation irréductible D du groupe du vecteur $\vec{k}$. En appliquant K à ces n fonctions, nous obtenons un nouvel ensemble de n fonctions dégénérées entre elles puisque K commute avec l'hamiltonien. La représentation obtenue sera une représentation irréductible du groupe de vecteur $\vec{k}$. Le problème est de déterminer si cette représentation est une représentation équivalente à la représentation origine ou non.

Dans le cas où nous négligeons l'interaction spin-orbite, l'opérateur renversement du temps s'identifie avec la conjugaison complexe. Les fonctions obtenues se transforment par les opérations du groupe suivant la représentation conjuguée, soit D^* .

Nous utiliserons le test de C. Herring [6] quand aucune autre méthode plus évidente n'est disponible, soit

$$\sum_{Q_0} \chi(Q_0^2) = \begin{cases} +g & (\text{cas 1}) \\ 0 & (\text{cas 2}) \\ -g & (\text{cas 3}) \end{cases}$$

Q_0 étant un opérateur du groupe spatial qui transforme $\vec{k}$ en $-\vec{k}$ (donc Q_0^2 appartient au groupe g^k d'ordre g).

Dans le cas 1, il n'y a pas de dégénérescence supplémentaire.

Dans le cas 2, D et D^* apparaissent ensemble et dans le cas 3, D apparaît deux fois.

Les résultats de l'effet du renversement du temps sont portés dans les tableaux ci-dessus donnant les caractères des représentations irréductibles des groupes g^k .

III.5 - RELATIONS DE COMPATIBILITE

L'étude de la continuité des représentations irréductibles nous permet de donner des indications générales sur les courbes $E(\vec{k})$, où $\vec{k}$ décrit des lignes de symétrie de la zone de Brillouin. L'utilisation des caractères permet de déterminer directement les relations de continuité des représentations (compatibilité), relations résumées dans les tableaux suivants:

Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ_{15}	Γ_{25}
Δ_1	Δ_2	$\Delta_1 + \Delta_2$	$\Delta_1 + \Delta_3 + \Delta_4$	$\Delta_2 + \Delta_3 + \Delta_4$
Λ_1	Λ_2	Λ_3	$\Lambda_1 + \Lambda_3$	$\Lambda_2 + \Lambda_3$
Σ_1	Σ_2	$\Sigma_1 + \Sigma_2$	$\Sigma_1 + \Sigma_1 + \Sigma_2$	$\Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_2$

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
Δ_1	Δ_2	Δ_1	Δ_2	$\Delta_3 + \Delta_4$
S_1	S_2	S_1	S_2	$S_1 + S_2$
Z_1	Z_1	Z_2	Z_2	$Z_1 + Z_2$

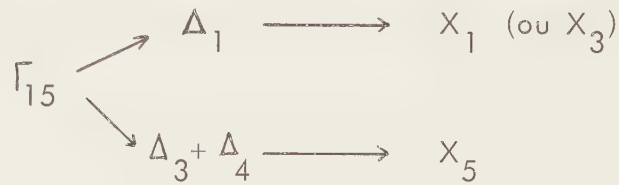
L_1	L_2	L_3
Λ_1	Λ_2	Λ_3
R_1	R_2	$R_1 + R_2$

K_1	K_2
Σ_1	Σ_2
R_1	R_2

W_1	W_2	W_3	W_4
Z_1	Z_2	Z_1	Z_2

Exemple: Suivant l'axe $\{1,0,0\}$, partant de $\vec{k} = 0$ (point Γ), le niveau Γ_{15} , 3 fois dégénéré, se sépare en deux niveaux, Δ_1 d'ordre 1 et $\Delta_3 + \Delta_4$ d'ordre 2 couplés par le renversement du temps.

Sur la surface de la zone de Brillouin (point X), Δ_1 tend vers les niveaux X_1 (ou X_3) et $\Delta_3 + \Delta_4$ tend vers X_5 .



III.6 - HARMONIQUES DU RESEAU

Nous avons vu, dans le chapitre précédent (relation (II.2.16)), que la fonction d'onde associée à une représentation irréductible, autour d'un atome et dans la sphère correspondante, pouvait se développer suivant les fonctions $y^s_{l\mu}(\vec{r}_j)$. Il est donc indispensable de connaître la forme de ces fonctions qui sont des combinaisons linéaires d'harmoniques sphériques de même l et que l'on appelle harmoniques de réseau.

Dans le tableau III.2 les $y_{l\mu}$ obtenus par D.G.Bell [7] correspondant aux différentes représentations irréductibles des groupes g^k sont classés pour les valeurs de $l \leq 2$.

Ces fonctions sont normées sur une sphère de rayon 1 ($x^2 + y^2 + z^2 = 1$). [En regard des notations utilisées pour les représentations, j'ai indiqué les notations correspondantes utilisées par D.G. Bell].

l		0	1	2
B_S	Γ_1	1	-	-
B_P	Γ_{15}	-	$3^{1/2} \quad x$ $- \quad y$ $- \quad z$	$(15)^{1/2} \quad y \quad z$ $- \quad z \quad x$ $- \quad x \quad y$
O_S	Δ_1	1	$3^{1/2} \quad x$	$(\frac{5}{4})^{1/2} [2x^2 - y^2 - z^2]$ $(15)^{1/2} \quad y \quad z$
$O_{P'}$	Δ_4	-	$(\frac{3}{2})^{1/2} [y + z]$	$(\frac{15}{2})^{1/2} [zx + xy]$
O_D	Δ_2	-	-	$(\frac{15}{4})^{1/2} [y^2 - z^2]$
O_P	Δ_3	-	$(\frac{3}{2})^{1/2} [y - z]$	$(\frac{15}{2})^{1/2} [zx - xy]$
H_S	X_1	1	-	$(\frac{5}{4})^{1/2} [2x^2 - y^2 - z^2]$
H_P	X_3	-	$3^{1/2} \quad x$	$(15)^{1/2} \quad y \quad z$
$H_{P'}$	X_5	-	$3^{1/2} \quad y$ $3^{1/2} \quad z$	$(15)^{1/2} \quad z \quad x$ $(15)^{1/2} \quad x \quad y$

Tableau III.2

l		0	1	2
I_S	Λ_1, L_1	1	$x + y + z$	$(\frac{15}{3})^{1/2} [yz + zx + xy]$
I_P	Λ_3, L_3	-	$\frac{1}{\sqrt{2}} [2x - y - z]$ $(\frac{3}{2})^{1/2} [y - z]$	$(\frac{5}{4})^{1/2} [2x^2 - y^2 - z^2]$ $(\frac{15}{4})^{1/2} [y^2 - z^2]$ $(\frac{15}{6})^{1/2} [2yz - zx - xy]$ $(\frac{15}{2})^{1/2} [zx - xy]$
R_S	Σ_1	1	$3^{1/2} x$ $(\frac{3}{2})^{1/2} [y + z]$	$(15)^{1/2} yz$ $(\frac{15}{2})^{1/2} [zx + xy]$ $(\frac{5}{4})^{1/2} [2x^2 - y^2 + z^2]$
R_P	Σ_2	-	$(\frac{3}{2})^{1/2} [y - z]$	$(\frac{15}{4})^{1/2} [y^2 - z^2]$ $(\frac{15}{2})^{1/2} [zx - xy]$

Tableau III.2(suite)

Chapitre IV

DETERMINATION DES COEFFICIENTS DE STRUCTURE

La détermination des coefficients de structure $A_{l'm, l'm'}^{ii'}$ constitue la partie nécessitant le plus de temps calcul. Il faudra donc utiliser une méthode qui permette d'obtenir les résultats à l'aide d'une formule rapidement convergente. Cependant la méthode devra être assez générale pour s'appliquer, sans de grandes modifications, à tous les cristaux et comporter un moyen de vérification simple.

L'utilisation de la double sommation d'Ewald [8], [3] d'une part, des symétries du cristal d'autre part, répond aux conditions ci-dessus.

Auparavant, je vais exposer quelques propriétés caractéristiques des coefficients A et B définis par les relations (II.2.10) et (II.2.19).

IV.1 - PROPRIETES CARACTERISTIQUES DES COEFFICIENTS A et B .

En utilisant la propriété d'hermiticité (II.1.8) de $G(\vec{r}, \vec{r}')$ et son développement (II.2.10), il est facile de montrer:

Lorsque $E > 0$, les fonctions de Bessel sphériques j_L et de Newmann sphériques η_L ont des arguments réels et l'on a:

$$\begin{aligned} A_{l'm', lm}^{ii'} &= A_{lm, l'm'}^{ii'*} \\ B_{l'\mu', l\mu}^{ii'} &= B_{l\mu, l'\mu'}^{ii'*} \end{aligned} \quad (\text{IV.1.1})$$

.. Lorsque $E < 0$, j_L et η_L sont tels que

$$\begin{aligned} j_L^* &= (-1)^L j_L \\ \eta_L^* &= (-1)^{L-1} \eta_L \end{aligned} \quad (\text{IV.1.2})$$

et dans ce cas les coefficients A et B vérifient les relations:

$$\begin{aligned} A_{l'm', lm}^{ii'} &= (-1)^{L+L'} A_{lm, l'm'}^{ii'*} \\ B_{l'\mu', l\mu}^{ii'} &= (-1)^{L+L'} B_{l\mu, l'\mu'}^{ii'*} \end{aligned} \quad (\text{IV.1.3})$$

Dans ce dernier cas la matrice dont le déterminant est donné par (II.2.18) n'est pas hermitique. Il est possible de la rendre hermitique: en multipliant chaque ligne L par i^L et chaque colonne L' par $i^{L'}$. Le coefficient $B_{l\mu, l'\mu'}^{ii'}$ deviendra $i^{(L+L')} B_{l\mu, l'\mu'}^{ii'}$. Les termes diagonaux, multipliés par $i^{2L} = (-1)^L$ resteront réels.

Il suffira donc de calculer les coefficients des termes diagonaux et la moitié des coefficients des termes non diagonaux.

IV.2 - INTRODUCTION DES COEFFICIENTS D

Suivant Kohn et Rostoker [1], il est possible d'évaluer les coefficients A , qui ne sont pas tous indépendants, à partir d'un nombre beaucoup plus restreint de coefficients indépendants.

D'après la relation (II.1.6) on peut voir que $G(\vec{r}, \vec{r}')$ ne dépend que de $\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'$, soit $G(\vec{R})$. On pourra donc écrire $G(\vec{R}) = G^{ii'}(\vec{R}_{ii'})$ sous la forme

$$G^{ii'}(\vec{R}_{ii'}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\cos(\kappa R_{ii'})}{R_{ii'}} \delta_{ii'} + \sum_{LM} D_{LM}^{ii'} j_L(\kappa R_{ii'}) Y_{LM}(\vec{R}_{ii'}) \quad (\text{IV.2.1})$$

avec

$$\vec{R}_{ii'} = \vec{r}_i - \vec{r}'_{i'}$$

En identifiant (II.2.10) et (IV.2.1), on obtient

$$\sum_{LM} D_{LM}^{jj'} j_L(\kappa R_{jj'}) Y_{LM}(\vec{R}_{jj'}) = \sum_{l_m, l'_m} A_{l_m, l'_m}^{jj'} j_l(\kappa r_j) j_{l'}(\kappa r'_{j'}) Y_{l_m}(\vec{r}_j) Y_{l'_m}^*(\vec{r}'_{j'}) \quad (\text{IV.2.2})$$

Si on développe l'onde plane $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{ii'}}$ en harmoniques sphériques,

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{ii'}} = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(\kappa R_{ii'}) Y_{lm}(\vec{R}_{ii'}) Y_{l'm'}^*(\vec{k}) \quad (\text{IV.2.3})$$

En multipliant les deux membres de l'équation (IV.2.3) par $Y_{LM}(\vec{k})$ et en intégrant, on obtient

$$\begin{aligned}
j_L(\kappa R_{ii'}) Y_{LM}(\vec{R}_{ii'}) &= \frac{1}{4\pi} i^{-L} \int e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{R}_{ii'}} Y_{LM}(\vec{\kappa}) d\Omega_{\kappa} \\
&= \frac{1}{4\pi} i^{-L} \int e^{i\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_i} e^{-i\vec{\kappa} \cdot \vec{r}_{i'}} Y_{LM}(\vec{\kappa}) d\Omega_{\kappa} \\
&= \frac{1}{4\pi} i^{-L} \sum_{lm} \sum_{l'm'} i^{l-l'} j_l(\kappa r_i) j_{l'}(\kappa r_{i'}) Y_{lm}(\vec{r}_i) Y_{l'm'}^*(\vec{r}_{i'}) \times C_{LM,lm,l'm'}
\end{aligned}$$

avec

$$C_{LM,lm,l'm'} = \int Y_{LM} Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\Omega \quad (\text{IV.2.4})$$

On obtient la relation entre les coefficients A et D

$$A_{lm, l'm'}^{ii'} = 4\pi i^{l-l'} \sum_{LM} i^{-L} D_{LM}^{ii'} C_{LM,lm,l'm'} \quad (\text{IV.2.5})$$

Les coefficients $C_{LM,lm,l'm'}$ peuvent être déterminés d'une manière générale à l'aide des relations de composition des harmoniques sphériques et de la formule de Racah [9].

Des coefficients analogues ont été tabulés [10].

En utilisant le fait que les coefficients $C_{LM,lm,l'm'}$ sont nuls pour $M \neq m - m'$ et pour $L \neq |l-l'|, |l-l'+2|, \dots, |l+l'|$ on obtient

$$A_{lm, l'm'}^{ii'} = 4\pi i^{l-l'} \sum_L i^{-L} D_{L, m-m'}^{ii'} C_{L, m-m', lm, l'm'} \quad (\text{IV.2.6})$$

IV.3 - METHODE DE LA DOUBLE SOMMATION D'EWALD [8] .

La fonction de Green $G(\vec{R})$ peut se mettre sous la forme

$$G(\vec{R}) = - \frac{1}{4\pi} \sum_s \frac{e^{i\kappa |\vec{R}-\vec{r}_s|}}{|\vec{R}-\vec{r}_s|} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_s} \quad (\text{IV.3.1})$$

$\vec{r}_s$ est un vecteur du réseau direct.

Suivant Ewald

$$\frac{e^{i\kappa |\vec{R}-\vec{r}_s|}}{|\vec{R}-\vec{r}_s|} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{O(c)}^{\infty} e^{-(\vec{R}-\vec{r}_s)^2 \xi^2 + \frac{\kappa^2}{4\xi^2}} \quad (\text{IV.3.2})$$

Le contour d'intégration se situe dans le plan complexe de telle sorte que le départ se situe dans le quart de plan complexe correspondant à une partie réelle positive et une partie imaginaire négative.

Cette formule s'obtient en transformant la représentation intégrale de la fonction de Hankel $H_{-1/2}^1(z)$.

$$H_{-\frac{1}{2}}^1(z) = \frac{1}{\pi i} \int_{O(c)}^{\infty} u^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{2}z(u - \frac{1}{u})} du \quad (\text{IV.3.3})$$

et en la comparant à sa forme analytique

$$H_{-\frac{1}{2}}^1(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{iz} \quad (\text{IV.3.4})$$

en posant $z = \kappa |\vec{R} - \vec{r}_s|$

$$u = -2 \frac{|\vec{R} - \vec{r}_s| \xi^2}{\kappa}$$

κ devra être ainsi un nombre à partie réelle positive et à partie imaginaire non nulle. On peut montrer que les formules restent valables par continuité lorsque κ tend vers un nombre réel positif.

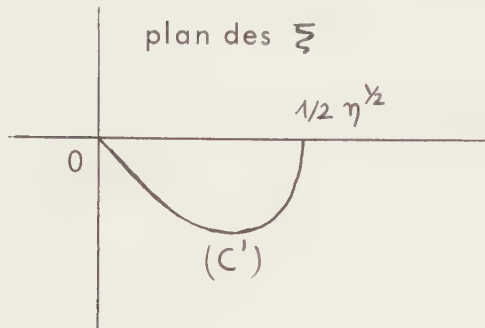


Figure IV.1

En utilisant le contour d'intégration (C') de la figure IV.1, la fonction de Green se sépare en deux

$$G(\vec{R}) = G_1(\vec{R}) + G_2(\vec{R})$$

$$G_1(\vec{R}) = -\frac{1}{4\pi} \sum_s e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_s} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{0(C')}^{\frac{1}{2}\eta^{1/2}} e^{-\frac{(\vec{R}-\vec{r}_s)^2}{\xi^2} \xi^2 + \frac{\kappa^2}{4\xi^2}} d\xi \quad (\text{IV.3.5})$$

$$G_2(\vec{R}) = -\frac{1}{4\pi} \sum_s e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_s} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{1}{2}\eta^{1/2}}^{\infty} e^{-\frac{(\vec{R}-\vec{r}_s)^2}{\xi^2} \xi^2 + \frac{\kappa^2}{4\xi^2}} d\xi \quad (\text{IV.3.6})$$

On transforme $G_1(\vec{R})$ en utilisant l'identité, [3],

$$\sum_s e^{-|\vec{R}-\vec{r}_s|^2 \xi^2 + i\vec{k} \cdot (\vec{r}_s - \vec{R})} = \frac{\pi^{3/2}}{\xi^3} \sum_n e^{-\frac{(\vec{K}_n + \vec{k})^2}{4\xi^2} + i\vec{K}_n \cdot \vec{R}} \quad (\text{IV.3.7})$$

$G_1(\vec{R})$ prend la forme

$$G_1(\vec{R}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\pi^{3/2}}{\tau} \sum_n e^{i(\vec{k} + \vec{K}_n) \cdot \vec{R}} \int_0^{\frac{1}{2}\eta^{1/2}} \frac{1}{\xi^3} e^{-\frac{(\vec{k} + \vec{K}_n)^2}{4\xi^2} + \frac{\kappa^2}{4\xi^2}} d\xi \quad (\text{IV.3.8})$$

En intégrant, $G_1(\vec{R})$ devient

$$G_1(\vec{R}) = -\frac{1}{\tau} \sum_n \frac{e^{i(\vec{k} + \vec{K}_n) \cdot \vec{R}} e^{[-(\vec{K}_n + \vec{k})^2 + E]/\eta}}{(\vec{K}_n + \vec{k})^2 - E} \quad (\text{IV.3.9})$$

En posant

$$\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}' = \vec{r}_i - \vec{r}_{i'} - (\vec{a}_{i'} - \vec{a}_i) = \vec{R}_{ii'} - (\vec{a}_{i'} - \vec{a}_i) \quad (\text{IV.3.10})$$

alors

$$G_1(\vec{R}) = G_1^{ii'}(\vec{R}_{ii'}) = -\frac{1}{\tau} e^{i(\vec{k} + \vec{K}_n)(\vec{a}_i - \vec{a}_{i'})} \sum_n \frac{e^{i(\vec{k} + \vec{K}_n)\vec{R}_{ii'} [- (\vec{k} + \vec{K}_n)^2 + E]/\eta}}{(\vec{k} + \vec{K}_n)^2 - E} \quad (\text{IV.3.11})$$

$$G_2(\vec{R}) = G_2^{ii'}(\vec{R}_{ii'}) = -\frac{1}{2\pi^{3/2}} \sum_s e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_s} \int_{\frac{1}{2}\eta^{1/2}}^{\infty} e^{-(\vec{R}_{ii'} - \vec{a}_{i'} + \vec{a}_i - \vec{r}_s)^2 / 4\bar{\xi}^2 + E/4\bar{\xi}^2} d\bar{\xi} \quad (\text{IV.3.12})$$

On développe alors $G_1(\vec{R})$ et $G_2(\vec{R})$ en harmoniques sphériques suivant la relation (IV.2.3), on identifie avec la relation (IV.2.1) et en faisant tendre $\vec{R}_{ii'}$ vers 0 sachant que $j_L(x) \sim x^L$ lorsque $x \rightarrow 0$, on obtient

$$\begin{aligned} D_{LM}^{ii'} = & -\frac{4\pi}{\tau} \frac{i^L}{K^L} \sum_n e^{i(\vec{k} + \vec{K}_n)(\vec{a}_i - \vec{a}_{i'})} \frac{e^{E - (\vec{k} + \vec{K}_n)^2}}{(\vec{k} + \vec{K}_n)^2 - E} \{ \vec{k} + \vec{K}_n \}^L Y_{LM}^*(\vec{k} + \vec{K}_n) \\ & + \frac{\pi^{1/2} (-2)^{L+1} i^{2L}}{K^L} \sum_s e^{i\vec{k}(\vec{a}_i - \vec{a}_{i'})} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{ii';s}} r_{ii';s}^L Y_{LM}^*(r_{ii';s}) \times \\ & \int_{\frac{1}{2}\eta^{1/2}}^{\infty} \bar{\xi}^{2L} e^{-r_{ii';s}^2 / \bar{\xi}^2 + E/4\bar{\xi}^2} d\bar{\xi} \\ & - \delta_{L0} \delta_{ii'} \frac{\eta^{1/2}}{2\pi} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(E/\eta)}{\nu! (2\nu-1)} \end{aligned} \quad (\text{IV.3.13})$$

avec $\vec{r}_{jj';s} = \vec{r}_s - (\vec{a}_j - \vec{a}_{j'})$

le signe $\sum_s^1$ signifie que le terme $s = 0$ est à éviter lorsque $j = j'$ et $L = 0$.

IV.4 - UTILISATION DES SYMETRIES DU CRISTAL

IV.4.1 - Invariance de la fonction de Green

Si on reprend le développement (II.1.6) de $G(\vec{R})$ en y remplaçant $\vec{R}$ par $\vec{R}_{jj'} = (\vec{a}_{j'} - \vec{a}_j)$ il vient:

$$G_k^{jj'}(\vec{R}_{jj'}) = -\frac{1}{\tau} e^{i\vec{k}(\vec{a}_j - \vec{a}_{j'})} \sum_n e^{i\vec{K}_n(\vec{a}_j - \vec{a}_{j'})} \frac{e^{i(\vec{k} + \vec{K}_n)\vec{R}_{jj'}}}{(\vec{k} + \vec{K}_n)^2 - E} \quad (\text{IV.4.1})$$

Pour diminuer le nombre de coefficients à calculer, regardons le résultat de l'application sur $G_k^{jj'}(\vec{R}_{jj'})$ d'un opérateur S du groupe de symétrie du vecteur $\vec{k}$.

$$S G_k^{jj'}(\vec{R}_{jj'}) = -\frac{1}{\tau} e^{i\vec{k}(\vec{a}_j - \vec{a}_{j'})} \sum_n e^{i\vec{K}_n(\vec{a}_j - \vec{a}_{j'})} \frac{e^{iS(\vec{k} + \vec{K}_n)\vec{R}_{jj'}}}{(\vec{k} + \vec{K}_n)^2 - E} \quad (\text{IV.4.2})$$

car

$$S G_k^{jj'}(\vec{R}_{jj'}) = G_k^{jj'}(S^{-1}\vec{R}_{jj'}) \quad \text{et} \quad e^{i(\vec{k} + \vec{K}_n)S^{-1}\vec{R}_{jj'}} = e^{iS(\vec{k} + \vec{K}_n)\vec{R}_{jj'}}$$

De plus les égalités suivantes:

$$\left. \begin{aligned}
 S \vec{k} &= \vec{k} + \vec{K}_q \\
 S(\vec{k} + \vec{K}_n) &= \vec{k} + \vec{K}_p \quad \text{avec} \quad |\vec{k} + \vec{K}_n|^2 = |\vec{k} + \vec{K}_p|^2 \\
 S \vec{K}_n &= \vec{K}_p - \vec{K}_q \quad \text{ou} \quad \vec{K}_n = S^{-1}(\vec{K}_p - \vec{K}_q) \\
 S(\vec{a}_i - \vec{a}_{i'}) &= \vec{a}_i - \vec{a}_{i'} + \vec{r}_S \quad ; \quad e^{i(\vec{K}_p - \vec{K}_q) \cdot \vec{r}_S} = 1
 \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV.4.3})$$

permettent de mettre la relation (IV.4.2) sous la forme:

$$S G_k^{ii'}(\vec{R}_{ii'}) = -\frac{1}{\tau} e^{i\vec{k}(\vec{a}_i - \vec{a}_{i'})} \sum_P e^{i(\vec{K}_p - \vec{K}_q)(\vec{a}_i - \vec{a}_{i'})} \frac{e^{i(\vec{k} + \vec{K}_p) \cdot \vec{R}_{ii'}}}{|\vec{k} + \vec{K}_p|^2 - E} \quad (\text{IV.4.4})$$

En comparant les expressions (IV.4.1) et (IV.4.2), il vient donc:

$$S G_k^{ii'}(\vec{R}_{ii'}) = e^{-i\vec{K}_q(\vec{a}_i - \vec{a}_{i'})} G_k^{ii'}(\vec{R}_{ii'}) \quad (\text{IV.4.5})$$

Cette identité montre que:

- . dans le cas où l'extrêmité du vecteur $\vec{k}$ choisi est à l'intérieur de la première zone ($K_q = 0$), la fonction de Green est invariante par les opérations du groupe du vecteur $\vec{k}$.
- . dans le cas où l'extrêmité du vecteur $\vec{k}$ est sur la surface de la première zone de Brillouin la fonction de Green ne sera invariante par rapport aux opérations du groupe du vecteur $\vec{k}$ que dans l'un des deux cas suivants:

$$\bullet K_q = 0 \quad \text{si} \quad S\vec{k} = \vec{k}$$

$$\bullet \text{ si accidentellement } \vec{K}_q \text{ est perpendiculaire à } \vec{a}_i - \vec{a}_{i'}$$

IV.4.2 - Restriction du nombre de coefficients D à calculer

Récrivons le développement (IV.2.1) de $G^{ii'}(\vec{R}_{ii'})$ en explicitant les parties réelle et imaginaire des harmoniques sphériques Y_{LM} :

$$G^{ii'}(\vec{R}_{ii'}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\cos \kappa R_{ii'}}{R_{ii'}} \delta_{ii'} + \sum_{LM} \mathcal{D}_{LM}^{ii'} i_L(\kappa R_{ii'}) Y_{LM}(\vec{R}_{ii'}) \quad (\text{IV.4.6})$$

avec

$$\left. \begin{aligned} Y_{LM} &= \left[\frac{2L+1}{2\pi} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} \right]^{1/2} P_L^M(\cos \theta) \cos M \varphi \\ Y_{L-M} &= \left[\frac{2L+1}{2\pi} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} \right]^{1/2} P_L^M(\cos \theta) \sin M \varphi \\ Y_{L0} &= \left[\frac{2L+1}{4\pi} \right]^{1/2} P_L(\cos \theta) \end{aligned} \right\} \quad (\text{IV.4.7})$$

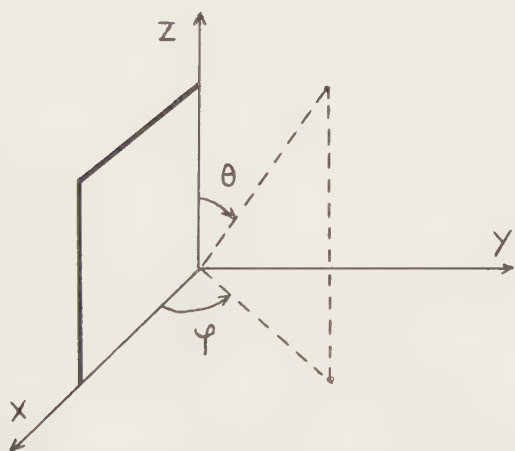


Figure IV.2

Parmi toutes les opérations S qui laissent invariante la fonction de Green, il sera possible pour les symétries par rapport à un plan de choisir ce plan comme plan de référence pour φ (figure IV.2). Ce choix permet de rendre nuls tous les coefficients $\mathcal{D}_{LM}^{ii'}$ où M est négatif.

Par identification des développements (IV.2.1) et (IV.4.6), il vient:

$$\begin{aligned} D_{LM}^{ii'} &= (-1)^M \frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{D}_{LM}^{ii'} & M > 0 \\ D_{L-M}^{ii'} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathcal{D}_{LM}^{ii'} \end{aligned} \quad (\text{IV.4.8})$$

De plus, en choisissant l'axe par rapport auquel est défini θ suivant un axe de symétrie, on diminue notablement le nombre de coefficients à calculer.

Sur le tableau ci-dessous sont rassemblés pour les différents points de la zone de Brillouin les coordonnées polaires utilisées et les valeurs des indices L et M pour lesquelles les coefficients $\mathcal{D}_{LM}^{ii'}$ ne sont pas nuls à priori, compte tenu des considérations précédentes.

$\cos \theta = \frac{x}{r}$ $\cos \varphi = \frac{y}{r \sin \theta}$ $\sin \varphi = \frac{z}{r \sin \theta}$	Γ	$i=i'$	LM 00; 40; 44
	Γ	$i \neq i'$	00; 32; 40; 44
	Δ	$i=i'$	00; 10; 20; 30; 40; 44
	Δ	$i \neq i'$	00; 10; 20; 22; 30; 32; 40; 42; 44
	X	$i=i'$	00; 20; 40; 44
	X	$i \neq i'$	10; 22; 30; 42
$\cos \theta = \frac{x+y+z}{\sqrt{3}r}$ $\cos \varphi = \frac{2z-x-y}{\sqrt{6}\sin \theta}$ $\sin \varphi = \frac{x-y}{\sqrt{2}r \sin \theta}$	Λ	$i=i'$	00; 10; 20; 30; 33; 40; 43
	Λ	$i \neq i'$	00; 10; 20; 30; 33; 40; 43
	L	$i=i'$	00; 20; 40; 43
	L	$i \neq i'$	00; 10; 20; 30; 33; 40; 43
$\cos \theta = \frac{x+y}{\sqrt{2}r}$ $\cos \varphi = \frac{x-y}{\sqrt{2}r \sin \theta}$ $\sin \varphi = \frac{z}{r \sin \theta}$	Σ, K	$i=i'$	00; 10; 20; 22; 30; 32; 40; 42; 44
	Σ, K	$i \neq i'$	00; 10; 11; 20; 21; 22; 30; 31; 32; 33; 40; 41; 42; 43; 44
	R	$i=i'$	idem Σ
	R	$i \neq i'$	idem Σ

IV.5 - PROGRAMMATION DU CALCUL DES COEFFICIENTS $D_{LM}^{ii'}$

J'ai disposé d'un ordinateur IBM 360 - 40 ne travaillant pas en nombres complexes. Pour cette raison j'ai préparé deux programmes, le premier (voir annexe 1) relatif au calcul des coefficients $D_{LM}^{ii'}$ pour $i \neq i'$, le second, que je ne présente pas ici, plus simple, ayant pour but de calculer les coefficients D_{LM}^{ii} tous réels ou imaginaires purs.

Dans ce programme est inclus un test de convergence qui détermine les dimensions des parallélépipèdes dans lesquels doivent être faites les sommations dans le réseau direct (r_s) et dans le réseau réciproque (K_n).

Pour le calcul de l'intégrale existant dans l'expression de $D_{LM}^{ii'}$ j'ai utilisé la méthode de Gauss d'ordre 4.

Les coefficients sont d'abord calculés pour une constante de réseau égale à 10 u. atomiques puis sont transformés pour le réseau relatif au Ga Sb.

Le programme a été testé simplement en changeant la valeur de η .
Pour les calculs j'ai pris $\eta = 0,4$.

Chapitre V

CHOIX DU POTENTIEL ET RESOLUTION DE L'EQUATION RADIALE

V.1 - GENERALITES SUR LE CHOIX DU POTENTIEL

Le potentiel cristallin $V(\vec{r})$, autour de chaque atome, possède la symétrie tétraédrique du groupe T_d . Développons $V(\vec{r})$ suivant les harmoniques du réseau, invariants par les opérations du groupe:

$$\begin{aligned}
 V(\vec{r}) &= V_0(r) + V_3(r) L_3(\vec{r}) + V_4(r) L_4(\vec{r}) + \dots \\
 \text{avec} \quad L_3(\vec{r}) &= -\frac{i}{\sqrt{8\pi}} (Y_{32} - Y_{3-2}) \\
 L_4(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left[\sqrt{\frac{7}{12}} Y_{40} + \sqrt{\frac{5}{24}} (Y_{44} + Y_{4-4}) \right]
 \end{aligned}
 \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} V(\vec{r}) &= V_0(r) + V_3(r) L_3(\vec{r}) + V_4(r) L_4(\vec{r}) + \dots \\ L_3(\vec{r}) &= -\frac{i}{\sqrt{8\pi}} (Y_{32} - Y_{3-2}) \\ L_4(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left[\sqrt{\frac{7}{12}} Y_{40} + \sqrt{\frac{5}{24}} (Y_{44} + Y_{4-4}) \right]} \right\} (V.1.1)$$

Le seul terme possédant la symétrie sphérique est le terme $V_0(r)$.

D'autre part, la méthode K.R. impose

- 1- de choisir, conformément à (II.2.1), un potentiel à symétrie sphérique à l'intérieur de chacune des deux sphères atomiques, et constant dans le reste de la maille.
- 2- de faire le changement d'origine des énergies $E - V_M$, V_M étant le potentiel moyen qui, dans l'intégrale (II.1.5) étendue au domaine extérieur aux sphères, donne le même résultat que le potentiel cristallin $V(\vec{r})$, quel que soit l'état $|k, n\rangle$ choisi.

Il faudra donc, dans la méthode K.R., utiliser comme potentiel, à l'intérieur des sphères atomiques, la quantité $V_O(\vec{r})$, et négliger les autres termes du développement (V.1.1). Le changement d'origine est supposé réalisé.

Je choisirai, comme potentiel de départ, un potentiel $V_{mt}(r)$ (muffin-tin) déterminé d'une façon simple, quoique réaliste (cf. paragraphe V.2). Puis, par une méthode de perturbation au premier ordre, je chercherai l'effet de la perturbation $V_O(r) - V_{mt}(r)$ à symétrie sphérique sur différents niveaux déterminés à l'aide de $V_{mt}(r)$ afin de recouper un certain nombre de résultats expérimentaux. Ceci permettra de faire le choix de deux paramètres (cf. paragraphe V.3). Avant de résoudre, enfin, l'équation radiale, je montrerai que l'effet faible des termes à symétrie non sphérique de $V(\vec{r})$ peut être compris dans le choix des paramètres.

V.2 - CHOIX DU POTENTIEL DE DEPART $V_{mt}(r)$

La façon la plus simple de choisir le potentiel approché $V_{mt}(r)$ est de superposer les potentiels des atomes libres de gallium et d'antimoine suivant un axe joignant leurs centres.

La figure V.1 donne l'aspect du potentiel ainsi déterminé.

Les potentiels des atomes libres de gallium et d'antimoine ont été tabulés par F. Herman et S. Skillman [11].

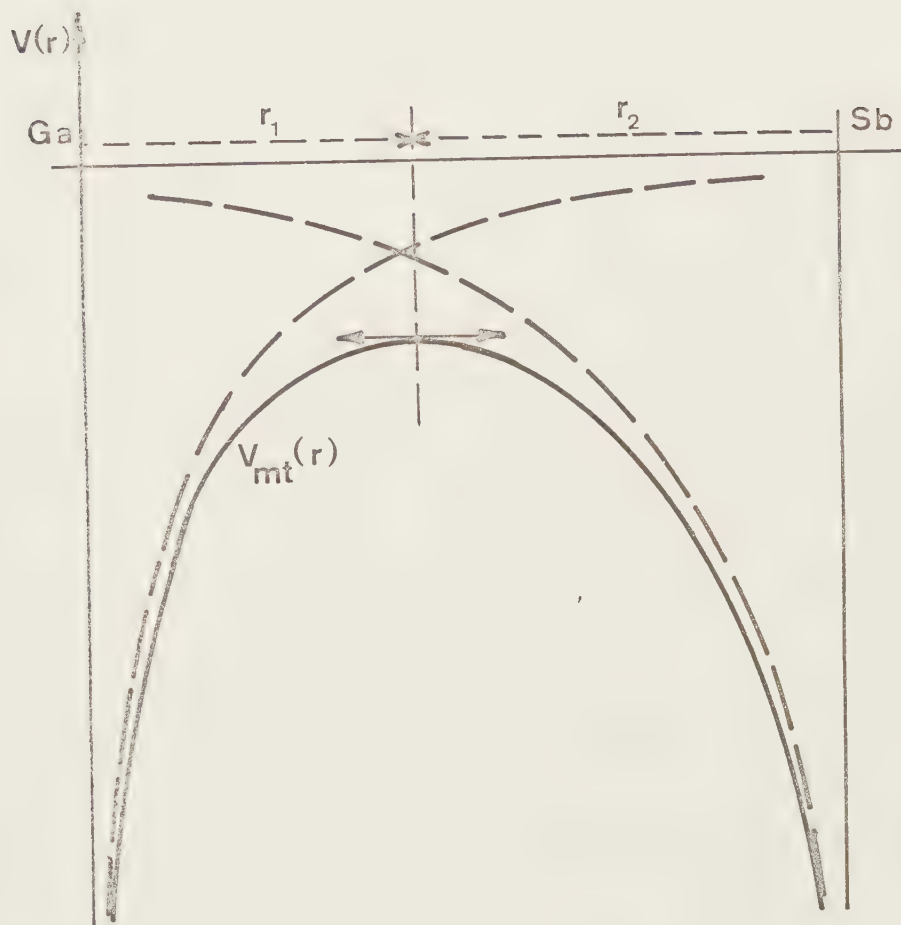


Figure V.1

Partie sphérique du potentiel $V_{mt}(r)$

Les rayons ρ_1 et ρ_2 des sphères atomiques ont été choisis de telle sorte que $\rho_1 \leq r_1$ et $\rho_2 \leq r_2$, soit

$$\rho_1 = 2,3166 \text{ u.A.}$$

(V.2.1)

$$\rho_2 = 2,5736 \text{ u.A.}$$

r_1 et r_2 sont les valeurs de r pour lesquelles le potentiel passe par un maximum

Le potentiel moyen V_M à l'extérieur des sphères atomiques est la valeur moyenne des potentiels atomiques dans le domaine compris entre la sphère atomique et la sphère équivalente (de même volume) à la maille élémentaire.

$$V_M = \sum_{j=1,2} \frac{\int_{\rho_j}^R V_j(r) 4\pi r^2 dr}{\tau - \tau_j} \quad (V.2.2)$$

avec

$$\tau = \frac{4\pi}{3} R^3 = \frac{a^3}{4} \quad \text{et} \quad \tau_j = \frac{4\pi}{3} \rho_j^3$$

La valeur de V_M , donnée par (V.2.2) est égale à $-1,332$ rydberg.

Dans le tableau V.1 sont données les valeurs du potentiel $V_{mt}(r)$ autour de chaque atome.

r	V Gallium
0.28183E-02	-0.21776E 05
0.56366E-02	-0.10774E 05
0.84550E-02	-0.71057E 04
0.11273E-01	-0.52717E 04
0.14092E-01	-0.41715E 04
0.16910E-01	-0.34386E 04
0.19728E-01	-0.29155E 04
0.22547E-01	-0.25236E 04
0.25365E-01	-0.22193E 04
0.28183E-01	-0.19762E 04
0.33820E-01	-0.16126E 04
0.39456E-01	-0.13539E 04
0.45093E-01	-0.11608E 04
0.50730E-01	-0.10114E 04
0.56366E-01	-0.89255E 03
0.62003E-01	-0.79590E 03
0.67640E-01	-0.71588E 03
0.73276E-01	-0.64866E 03
0.78913E-01	-0.59146E 03
0.84549E-01	-0.54226E 03
0.95823E-01	-0.46209E 03
0.10710E 00	-0.39971E 03
0.11837E 00	-0.34990E 03
0.12964E 00	-0.30931E 03
0.14092E 00	-0.27568E 03
0.15219E 00	-0.24742E 03
0.16346E 00	-0.22341E 03
0.17474E 00	-0.20278E 03
0.18601E 00	-0.18491E 03
0.19728E 00	-0.16931E 03
0.21983E 00	-0.14345E 03
0.24238E 00	-0.12298E 03
0.26492E 00	-0.10647E 03
0.28747E 00	-0.92970E 02
0.31001E 00	-0.81790E 02
0.33256E 00	-0.72431E 02
0.35511E 00	-0.64522E 02
0.37765E 00	-0.57772E 02
0.40020E 00	-0.51958E 02
0.42275E 00	-0.46913E 02
0.46784E 00	-0.38634E 02
0.51293E 00	-0.32194E 02
0.55803E 00	-0.27112E 02
0.60312E 00	-0.23057E 02
0.64821E 00	-0.19792E 02
0.69331E 00	-0.17138E 02
0.73840E 00	-0.14965E 02
0.78349E 00	-0.13168E 02
0.82859E 00	-0.11671E 02
0.87368E 00	-0.10413E 02
0.96387E 00	-0.84436E 01
0.10541E 01	-0.65931E 01
0.11442E 01	-0.59028E 01
0.12344E 01	-0.50574E 01
0.13246E 01	-0.44218E 01
0.14148E 01	-0.39234E 01
0.15050E 01	-0.35349E 01
0.15952E 01	-0.32362E 01
0.16854E 01	-0.30029E 01
0.17755E 01	-0.28155E 01
0.18656E 01	-0.25484E 01
0.21363E 01	-0.23995E 01
0.23167E 01	-0.23485E 01
0.24970E 01	-0.23817E 01
0.26774E 01	-0.25041E 01
0.28578E 01	-0.27101E 01
0.30381E 01	-0.31489E 01

r	V Antimoine
0.23874E-02	-0.42258E 05
0.47747E-02	-0.20891E 05
0.71621E-02	-0.13769E 05
0.95495E-02	-0.10208E 05
0.11937E-01	-0.80738E 04
0.14324E-01	-0.66522E 04
0.16712E-01	-0.56382E 04
0.19099E-01	-0.48788E 04
0.21486E-01	-0.42893E 04
0.23874E-01	-0.38185E 04
0.28648E-01	-0.31147E 04
0.33423E-01	-0.26144E 04
0.38198E-01	-0.22413E 04
0.42973E-01	-0.19530E 04
0.47748E-01	-0.17238E 04
0.52522E-01	-0.15375E 04
0.57297E-01	-0.13834E 04
0.62072E-01	-0.12538E 04
0.66846E-01	-0.11434E 04
0.71621E-01	-0.10484E 04
0.81171E-01	-0.89332E 03
0.90720E-01	-0.77252E 03
0.10027E 00	-0.67606E 03
0.10982E 00	-0.59749E 03
0.11937E 00	-0.53243E 03
0.12892E 00	-0.47781E 03
0.13847E 00	-0.43145E 03
0.14802E 00	-0.39168E 03
0.15757E 00	-0.35731E 03
0.16712E 00	-0.32737E 03
0.18622E 00	-0.27794E 03
0.20531E 00	-0.23901E 03
0.22441E 00	-0.20773E 03
0.24351E 00	-0.18218E 03
0.26261E 00	-0.16103E 03
0.28171E 00	-0.14330E 03
0.30081E 00	-0.12830E 03
0.31991E 00	-0.11549E 03
0.33901E 00	-0.10444E 03
0.35811E 00	-0.94859E 02
0.39630E 00	-0.79103E 02
0.43450E 00	-0.66785E 02
0.47270E 00	-0.56999E 02
0.51090E 00	-0.49135E 02
0.54910E 00	-0.42739E 02
0.58729E 00	-0.37456E 02
0.62549E 00	-0.33035E 02
0.66369E 00	-0.29286E 02
0.70189E 00	-0.26080E 02
0.74009E 00	-0.23320E 02
0.81648E 00	-0.18865E 02
0.89288E 00	-0.15487E 02
0.96927E 00	-0.12891E 02
0.10457E 01	-0.10870E 02
0.11221E 01	-0.92759E 01
0.11985E 01	-0.80029E 01
0.12749E 01	-0.69753E 01
0.13513E 01	-0.61389E 01
0.14277E 01	-0.54522E 01
0.15040E 01	-0.48858E 01
0.16568E 01	-0.40226E 01
0.18096E 01	-0.34110E 01
0.19624E 01	-0.30064E 01
0.21152E 01	-0.27251E 01
0.22680E 01	-0.25342E 01
0.24208E 01	-0.24133E 01
0.25736E 01	-0.23578E 01

Tableau V.1- Partie sphérique du potentiel V_{mt}

Remarque: La superposition des potentiels des atomes libres sur tout le cristal, auquel serait ajouté un potentiel d'échange supplémentaire tel que F. Herman l'a proposé [12] serait certainement un meilleur potentiel non sphérique de départ. Il faudra alors déterminer l'harmonique correspondant à $l = 0$ de ce potentiel autour de chaque atome. Compte tenu de la symétrie du cristal, le potentiel ainsi déterminé serait très voisin du potentiel $V_{mt}(r)$.

V.3 - MODIFICATION DU POTENTIEL DE DEPART

V.3.1 - Généralités

A partir du potentiel de départ, $V_{mt}(r)$, et en appliquant la méthode de K.R., les énergies correspondant aux niveaux Γ_1 et Γ_{15} en $k = 0$ et leurs fonctions d'onde respectives peuvent être déterminées.

J'utilise ces états non perturbés comme états de départ et je vais déterminer l'effet d'une perturbation $\delta V_o(r)$ au premier ordre, telle que

$$V_o(r) = V_{mt}(r) + \delta V_o(r) \quad (V.3.1)$$

Il sera alors possible d'introduire des potentiels perturbateurs moyens $\overline{\Delta V_o}$ et $\overline{\Delta V_1}$ qui donneront le même effet respectivement pour les niveaux Γ_1 et les niveaux Γ_{15V} et Γ_{15C} ; ces paramètres $\overline{\Delta V_o}$ et $\overline{\Delta V_1}$ seront déterminés de telle sorte que les distances $\Gamma_{1C} - \Gamma_{15V}$ et $\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V}$ se rapprochent le plus possible, compte tenu des limites de la méthode, des résultats expérimentaux.

V.3.2 - Expression de $\overline{\Delta V_o}$ (niveau Γ_1)

La fonction d'onde non perturbée correspondant à Γ_1 est dans la sphère j

$$y_1^i = C_o^i R_o^i(r) Y_{oo} + (C_3^i R_3^j L_3(\vec{r})) + \dots$$

En négligeant le terme correspondant à $l = 3$, on obtient

$$\delta E = \alpha \int_{\tau} y_1^{*}(r) \delta V_o(r) y_1(r) d\vec{r} \quad (V.3.2)$$

où α est une constante de normalisation

$$\delta E = \alpha \left[\sum_{j=1,2} |C_o^i|^2 \int_0^{p_j} r^2 R_o^{*i}(r) \delta V_o(r) R_o^i(r) dr \right] \quad (V.3.3)$$

Etudions le problème parallèle

$$V_o(r) = V_{mt}(r) + \overline{\Delta V_o} \quad (V.3.4)$$

où $\overline{\Delta V_o}$ est une constante. Dans ce cas on obtient

$$\delta E' = \alpha \left[\sum_{j=1,2} |C_o^i|^2 \int_0^{p_j} r^2 R_o^{*i}(r) R_o^i(r) dr \right] \overline{\Delta V_o} \quad (V.3.5)$$

Ainsi, en posant $\delta E = \delta E'$, $\overline{\Delta V_o}$ est déterminé par la relation:

$$\overline{\Delta V_o} = \frac{\sum_{j=1,2} |C_o^j|^2 \int_0^{p_j} r^2 R_o^{*j} \delta V_o(r) R_o^j dr}{\sum_{j=1,2} |C_o^j|^2 \int_0^{p_j} r^2 R_o^{j*} R_o^j dr} \quad (V.3.6)$$

V.3.3 - Expression de $\overline{\Delta V}_1$ (niveaux Γ_{15C} et Γ_{15V})

Pour le niveau Γ_{15} triplement dégénéré, la perturbation sphérique $\delta V_0(r)$ ne lèvera pas la dégénérescence. Il est donc possible d'utiliser pour chaque valeur de l une seule fonction (cf. paragraphe VI.1). En limitant le développement à $l = 2$,

$$\psi_{15} = C_1^i R_1^i(r) Y_{10} + C_2^i R_2^i(r) [Y_2^{-2} + Y_2^2] \quad (V.3.7)$$

En faisant de même que précédemment et en posant

$$V_0(r) = V_{mt}(r) + \overline{\Delta V}_1 \quad (V.3.8)$$

on obtient

$$\overline{\Delta V}_1 = \frac{\sum_{j=1,2} |C_1^j|^2 \int_0^{P_j} r^2 R_1^{j*} \delta V_0 R_1^j dr + \sum_{j=1,2} |C_2^j|^2 \int_0^{P_j} r^2 \delta V_0 R_2^{j*} R_2^j dr}{\sum_{j=1,2} |C_1^j|^2 \int_0^{P_j} r^2 R_1^{j*} R_1^j dr + |C_2^j|^2 \int_0^{P_j} r^2 R_2^{j*} R_2^j dr} \quad (V.3.9)$$

Je suppose, en première approximation, que $\overline{\Delta V}_1$ est le même pour les deux niveaux Γ_{15C} et Γ_{15V} .

Remarque 1 : Les dérivées logarithmiques obtenues pour les différentes valeurs de l sont alors prises comme quantités empiriques et sont utilisées pour la détermination de la structure de bande dans la zone de Brillouin. Ce procédé a l'avantage de faire intervenir le potentiel moyen V_M comme paramètre ajustable.

Remarque 2 : Le choix des paramètres $\overline{\Delta V}_0$ et $\overline{\Delta V}_1$ pourrait, évidemment, se faire en d'autres points remarquables de la zone de Brillouin.

V.3.4 - Choix empiriques des paramètres $\overline{\Delta V}_0$ et $\overline{\Delta V}_1$

Sur la figure V.2 est représenté le schéma qualitatif des bandes du Ga Sb en tenant compte de l'interaction spin-orbite, et ceci dans les directions $\{111\}$ et $\{100\}$. Les transitions optiques déterminées par M. Cardona et Al. [13] à la température ambiante y sont indiquées; les valeurs des énergies en électron-volt correspondantes sont données dans le tableau suivant.

E_0	$E_0 + \Delta_0$	E_1		$E_1 + \Delta_1$	E'_0	$E'_0 + \Delta'_0$	E_2	$E_2 + \delta_2$	E'_1
	1,52	2,03	2,75	2,49	3,27	3,56	4,20	4,57	5,50

Il faut noter que l'interprétation des transitions correspondant à E'_0 et $E'_0 + \Delta'_0$, proposée par M. Cardona est purement spéculative.

Choix de $\overline{\Delta V}_1$. Les transitions correspondantes aux énergies 3,27 et 3,56 eV, si elles ont bien lieu en $k = 0$, peuvent être interprétées par l'un des trois modèles schématisés sur la figure V.3, la valeur de Δ_0 étant 0,80 eV.

J'ai utilisé pour déterminer la position des niveaux Γ_7 et Γ_8 obtenus par éclatement des niveaux Γ_{15} par l'effet de l'interaction spin-orbite les résultats de E.O. Kane [14], soit

$$E(\Gamma_{7V}) = E(\Gamma_{15V}) + \Delta_0/3$$

$$E(\Gamma_{8V}) = E(\Gamma_{15V}) - 2\Delta_0/3$$

$$E(\Gamma_{7C}) = E(\Gamma_{15C}) + \Delta_{15}/3$$

$$E(\Gamma_{8C}) = E(\Gamma_{15C}) - 2\Delta_{15}/3$$

(ce qui revient à pondérer la position des niveaux en tenant compte de leur dégénérescence).

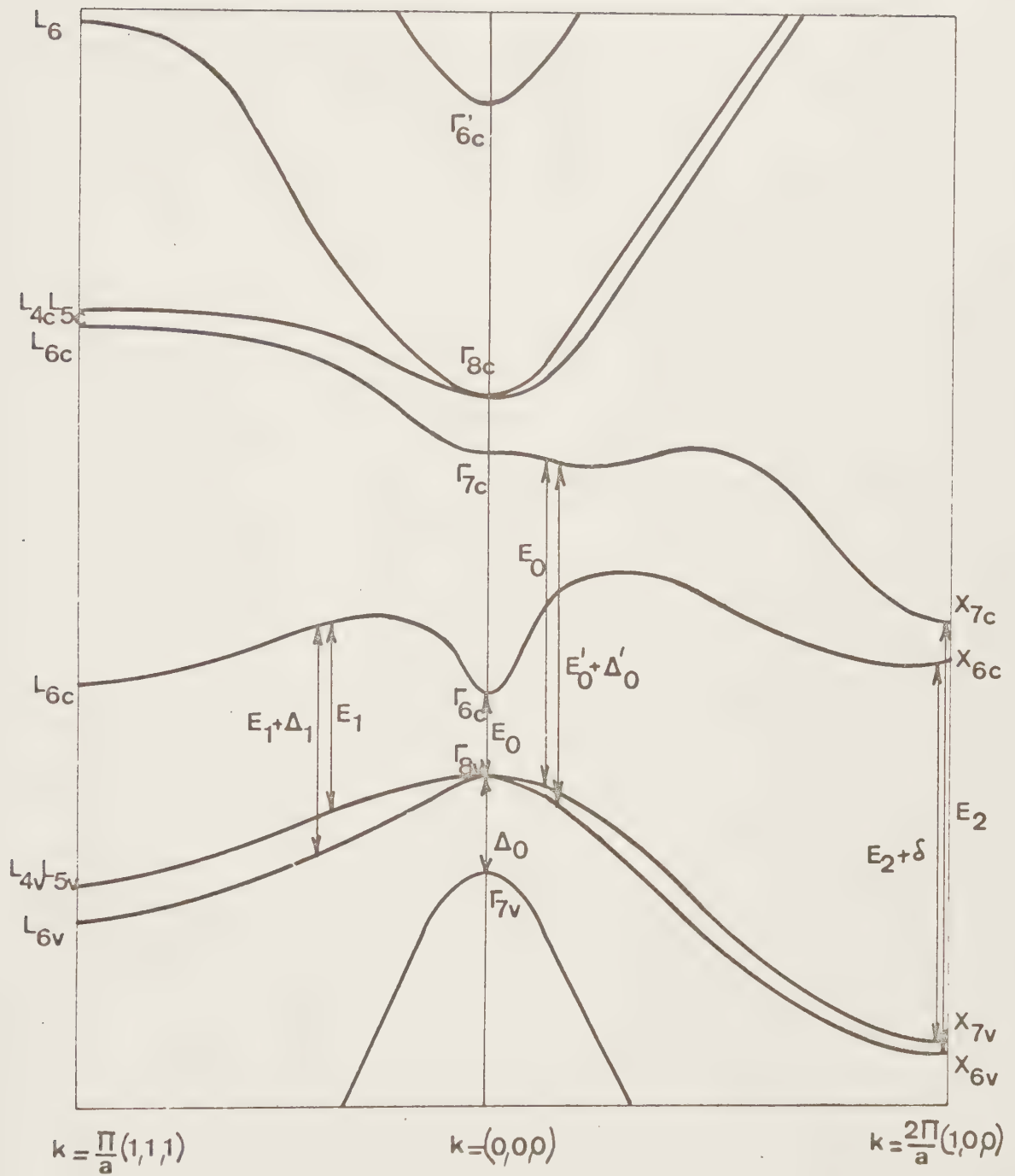


Fig. V.2 - Aspect qualitatif de la structure de bande de Ga Sb
(avec interaction spin-orbite)

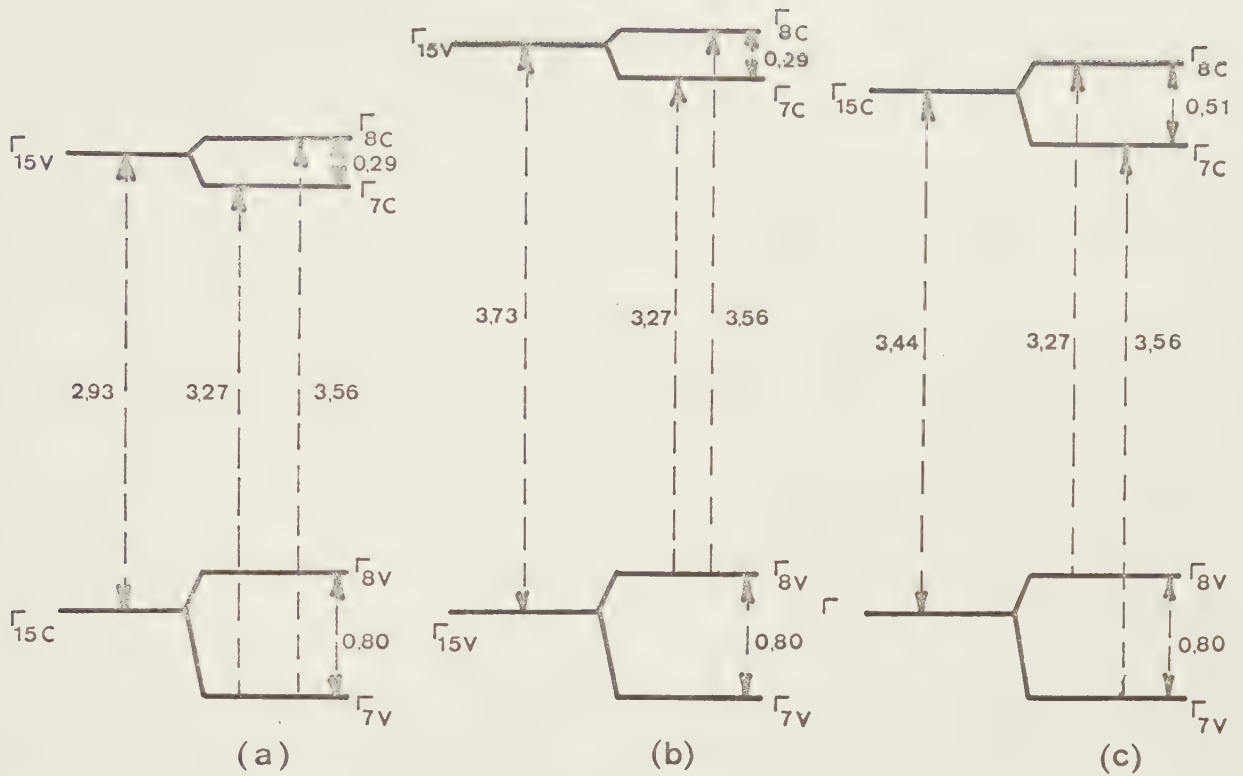


Fig: V 3.

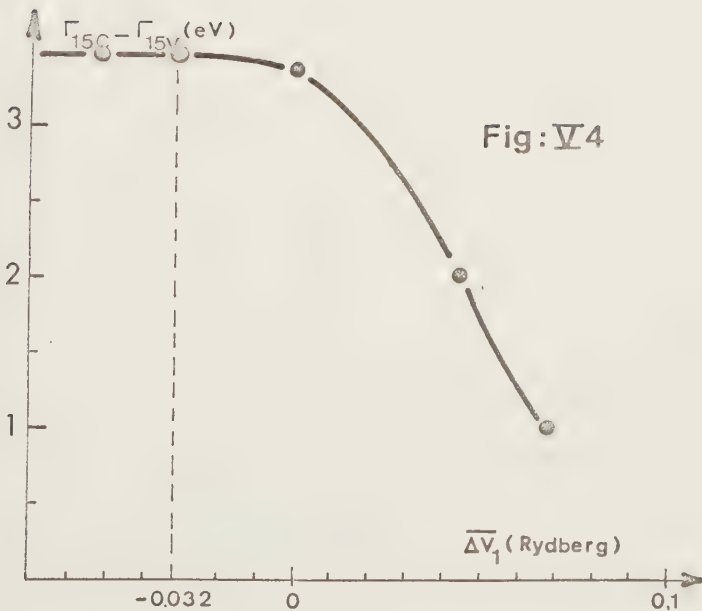


Fig: V4

Sur la figure V.4, je donne la variation de $\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V}$, calculée en fonction de ΔV_1 . J'ai choisi de prendre $\Delta V_1 = -0,032$ rydberg, valeur pour laquelle la distance entre les deux niveaux est stationnaire et égale à 3,40eV, cette valeur est très proche du modèle (c) de la figure V.3. De plus le modèle (c) permet d'interpréter un pic situé aux environs de 2,75eV et non interprété par M. Cardona.

Fig. V.4

Choix de $\overline{\Delta V}_0$: A la température ambiante, la valeur du gap direct en $k = 0$ est 0,72 eV. Avec $\Delta_0 = 0,80$ eV, on obtient (figure V.5)

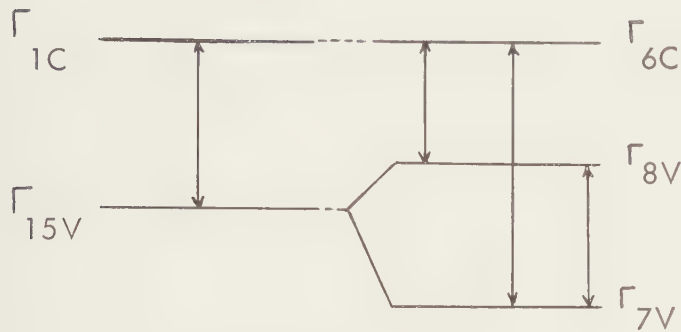


Fig. V.5

$$\Gamma_{1C} - \Gamma_{15V} = 0,72 + \frac{0,80}{3} \simeq 0,99 \text{ eV}$$

J'ai choisi de prendre $\overline{\Delta V}_0 = 0,068$ rydberg, valeur pour laquelle la distance $\Gamma_{1C} - \Gamma_{15V} = 0,95$ eV; cette valeur est très proche de celle déduite de la figure V.5.

V.4 - EFFET DES TERMES A SYMETRIE NON SPHERIQUE DU POTENTIEL

Déterminons l'effet, au premier ordre, de la perturbation

$$V_3(r) L_3(\vec{r}) + V_4(r) L_4(\vec{r}) + \dots \text{ (cf. relation V.1.1)}$$

Si on pose

$$V(\vec{r}) = V_0(r) + \sum_{l'm'} \alpha_{l'm'} V_{l'}(r) Y_{l'm'}(\vec{r}) \quad (\text{V.4.1})$$

$$\text{et } \psi(\vec{r}) = \sum_{lm} C_{lm}^i R_l^i(r) Y_{lm}(\vec{r}) \quad (\text{V.4.2})$$

on obtient

$$\delta E = \alpha \sum_{j=1,2} \sum_{lm, l'm', l''m''} K_{lm, l'm', l''m''}^j C_{l''m'', lm, l'm'} \quad (\text{V.4.3})$$

$$\text{où } K_{lm, l'm', l''m''}^j = C_{lm}^{j*} C_{l''m''}^j \alpha_{l'm'} \int_0^{\rho_j} 4\pi r^2 V_{l'}(r) R_l^{j*} R_{l''}^j dr$$

Les coefficients $C_{l''m'', l_m, l'm'}$ sont identiques à ceux définis en (IV.2.4).
Compte tenu de (V.1.1) on obtient le développement suivant:

$$\begin{aligned} \delta E = \alpha \sum_{j=1,2} \sum_{\substack{l_m, l'm', \\ l''m''}} \left\{ K_{l_m, l''m'', 3}^j \left(C_{l''m'', l_m, 32} + C_{l''m'', l_m, 3-2} \right) \right. \\ + K_{l_m, l''m'', 40}^j C_{l''m'', l_m, 40} \\ \left. + K_{l_m, l''m'', 4}^j \left(C_{l''m'', l_m, 44} + C_{l''m'', l_m, 4-4} \right) + \dots \right\} \end{aligned} \quad (V.4.4)$$

Ainsi d'après les propriétés des coefficients $C_{l''m'', l_m, l'm'}$ (cf. paragraphe IV.1), δE sera nulle si on limite le développement de $\psi(\vec{r})$ à $l=1$. Etant donnée la bonne convergence de la méthode K.R. il semble que l'effet de la perturbation soit faible même dans le cas où $\psi(\vec{r})$ est développée suivant des harmoniques correspondant à $l \leq 2$. De toute façon, il est possible d'en tenir compte empiriquement, du moins en partie, dans la détermination des paramètres $\overline{\Delta V}_0$ et $\overline{\Delta V}_1$.

V.5 - RESOLUTION DE L'EQUATION RADIALE

La partie radiale de la fonction d'onde est solution de l'équation différentielle

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right\} R_l(r) = 0 \quad (V.5.1)$$

La fonction $y_l(r) = r R_l(r)$ est solution de l'équation

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + E - V(r) \right\} y_l(r) = 0 \quad (\text{V.5.2})$$

ou encore

$$\frac{d^2 y_l(r)}{dr^2} = F(r) y_l(r)$$

avec

(V.5.3)

$$F(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} - E + V(r)$$

$V(r)$ peut se mettre sous la forme

$$V(r) = - \frac{2Z(r)}{r} \quad (\text{V.5.4})$$

$Z(r)$ tend vers Z , lorsque r tend vers 0, Z étant le numéro atomique de l'atome considéré.

Au voisinage de l'origine, on peut utiliser un développement linéaire de $Z(r)$

$$Z(r) = Z - \alpha r \quad (\text{V.5.5})$$

et $y_l(r)$ devient solution de l'équation

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + (E - 2\alpha) + \frac{2Z}{r} \right] y_l(r) = 0 \quad (\text{V.5.6})$$

Ainsi au voisinage de l'origine $y_l(r)$ sera une fonction hydrogénéoïde pour la valeur $E' = E - 2\alpha$ de l'énergie. La solution de l'équation (V.5.6) régulière à l'origine s'écrit sous forme du développement suivant:

$$y_l(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{l+1} (1 + \beta r + \gamma r^2 + \delta r^3 + \dots) \quad (\text{V.5.7})$$

où $\beta, \gamma, \delta \dots$ déterminés par identification dans l'équation (V.5.6) ont les valeurs

$$\begin{aligned}\beta &= -\frac{Z}{l+1} \\ \gamma &= \frac{2Z^2 - E'(l+1)}{2(l+1)(2l+3)} \\ \delta &= \frac{E'Z(3l+4) - 2Z^3}{6(l+1)(l+2)(2l+3)}\end{aligned}\quad (\text{V.5.8})$$

J'utiliserai donc comme valeurs de départ pour $y_l(r_0)$ et $y'_l(r_0)$ les valeurs déterminées à l'aide du développement (V.4.7) .

L'intégration de l'équation différentielle a été faite en utilisant une méthode Runge-Kutta d'ordre 4 [15]. Cette méthode possède l'avantage de pouvoir être utilisée avec un pas d'intégration quelconque. Je donne ici les formules utilisées.

Soit à intégrer $y'' = f(r, y, y')$
alors

$$\begin{aligned}y(r+h) &= y(r) + h y'(r) + \frac{1}{3} (k_1 + k_2 + k_3) \\ y'(r+h) &= y'(r) + \frac{1}{3h} (k_1 + 2k_2 + k_3 + k_4)\end{aligned}$$

avec (V.5.9)

$$\begin{aligned}k_1 &= \frac{h^2}{2} f(r, y(r), y'(r)) \\ k_2 &= \frac{h^2}{2} f\left(r + \frac{h}{2}; y(r) + \frac{h}{2} y'(r) + \frac{1}{4} k_1; y'(r) + \frac{1}{h} k_1\right) \\ k_3 &= \frac{h^2}{2} f\left(r + \frac{h}{2}; y(r) + \frac{h}{2} y'(r) + \frac{1}{4} k_1; y'(r) + \frac{1}{h} k_2\right) \\ k_4 &= \frac{h^2}{2} f(r+h; y(r) + h y'(r) + k_3; y'(r) + \frac{2}{h} k_3)\end{aligned}$$

Pour une équation du type (V.5.3), on obtient

$$\begin{aligned}
 k_1 &= \frac{h^2}{2} F(r) y_l(r) \\
 k_2 &= \frac{h^2}{2} F(r + \frac{h}{2}) \left[y_l(r) + \frac{h}{2} y'_l(r) + \frac{1}{4} k_1 \right] \\
 k_3 &= k_2 \\
 k_4 &= \frac{h^2}{2} F(r+h) \left[y_l(r) + h y'_l(r) + k_2 \right]
 \end{aligned}
 \tag{V.5.10}$$

La valeur $V(r + \frac{h}{2})$ a été déterminée en utilisant une interpolation de $Z(r)$ avec un polynôme de degré 4.

Je donne, en annexe II, le programme que j'ai utilisé pour déterminer les dérivées logarithmiques $R'/R = L$ et les termes diagonaux complémentaires aux B , fonctions de L , du déterminant (II.2.18).

Chapitre VI

OBTENTION DU DETERMINANT ET CALCULS

Dans ce chapitre, j'expose la manière dont sont obtenus les éléments du déterminant séculaire, et sa résolution.

VI.1 - CHOIX DES FONCTIONS COMPETITIVES

J'utilise comme fonctions compétitives en chaque point de la zone de Brillouin, les fonctions harmoniques déterminées par D.G. Bell (cf. tableau 2, chapitre III). Ces fonctions sont déterminées par rapport au même repère pour tous les points de la zone de Brillouin. Or pour le calcul des coefficients de structures A_{l_m, l'_m}^{ii} , j'ai choisi des repères particuliers pour chaque ligne de symétrie de la zone de Brillouin; ceci pour diminuer le nombre de ces coefficients non nuls. Il est donc nécessaire de déterminer le développement des harmoniques du cristal suivant les harmoniques sphériques déterminés par rapport au repère correspondant à chaque valeur de $\vec{k}$.

Pour chaque valeur de l , il est inutile d'utiliser l'ensemble des fonctions harmoniques du cristal lorsque la représentation a un ordre supérieur à 1. J'utiliserai pour chaque valeur de l , les fonctions qui se transforment suivant la même ligne de la matrice correspondante aux différentes opérations du groupe du vecteur $\vec{k}$.

Dans le tableau VI.1 sont réunies, pour chaque représentation irréductible et pour les différentes valeurs de L , les combinaisons linéaires d'harmoniques sphériques qui correspondent aux harmoniques du cristal se transformant de la même façon par les opérations du groupe.

Par exemple, la fonction d'essai pour un niveau Δ_1 sera, autour de chaque atome, sous la forme

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) = \Psi_1(\vec{r}_1) = & C_{00}^{(1)} Y_{00} + C_{10}^{(1)} Y_1^0 + C_{22}^{(1)} \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_2^{-2} + Y_2^2) \\ & + C_{20}^{(1)} Y_2^0 \end{aligned} \quad (\text{VI.1.1})$$

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) = \Psi_2(\vec{r}_2) = & C_{00}^{(2)} Y_{00} + C_{10}^{(2)} Y_1^0 + C_{22}^{(2)} \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_2^{-2} + Y_2^2) \\ & + C_{20}^{(2)} Y_2^0 \end{aligned}$$

L	0	1	2
Γ_1	Y_0^0	-	-
Γ_{15}	-	Y_1^0	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_2^{-2} + Y_2^2)$
Δ_1	Y_0^0	Y_1^0	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_2^{-2} + Y_2^2)$ Y_2^0
Δ_4	-	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_1^{-1} - Y_1^1)$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_2^{-1} - Y_2^1)$
Δ_3	-	$-\frac{i}{\sqrt{2}} (Y_1^1 + Y_1^{-1})$	$\frac{i}{\sqrt{2}} (Y_2^1 + Y_2^{-1})$

Tableau VI.1

l	0	1	2
X_1	Y_0^0	-	Y_2^0
X_3	-	Y_1^0	$\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_2^{-2} + Y_2^2)$
X_5	-	$\frac{1}{2} [(1-i) Y_1^{-1} - (1-i) Y_1^1]$	$\frac{1}{2} [(1+i) Y_2^{-1} - (1-i) Y_2^1]$
$\Lambda_1 L_1$	Y_0^0	Y_1^0	Y_2^0
$\Lambda_3 L_3$	-	$-\frac{i}{\sqrt{2}} (Y_1^1 + Y_1^{-1})$	$-\frac{i}{\sqrt{3}} (Y_2^{-1} + Y_2^1) + \frac{i}{\sqrt{6}} (Y_2^{-2} - Y_2^2)$ $\frac{i}{\sqrt{6}} (Y_2^{-1} + Y_2^1) + \frac{i}{\sqrt{3}} (Y_2^{-2} - Y_2^2)$
Σ_1	Y_0^0	Y_1^0 $\frac{1}{\sqrt{2}} (Y_1^{-1} - Y_1^1)$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} Y_2^0 + \frac{1}{2\sqrt{2}} (Y_2^2 + Y_2^{-2})$ $-\frac{i}{\sqrt{2}} (Y_2^2 - Y_2^{-2})$ $-\frac{1}{2} Y_2^0 + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} [Y_2^2 + Y_2^{-2}]$
Σ_2	-	$-\frac{i}{\sqrt{2}} [Y_1^1 + Y_1^{-1}]$	$-\frac{i}{\sqrt{2}} (Y_2^{-1} + Y_2^1)$ $-\frac{i}{\sqrt{2}} (Y_2^2 - Y_2^{-2})$

Tableau VI.1 (suite)

VI.2 - CALCULS

Dans le programme présenté en annexe III, les calculs sont effectués de la façon suivante:

- Les coefficients de Wigner $C_{LM, L'm', L''m''}$ sont calculés en utilisant les formules de Racah. Ces coefficients sont désignés par COE (I, J).
- Les coefficients $A_{lm, l'm'}^{ii'}$ sont alors calculés à partir des coefficients de Wigner et des coefficients de structure désignés par D(I, J, K). Les coefficients $A_{|m|, m'}^{ii'}$ sont d'abord désignés par A(I) puis par ATR (I, J, K), ATI (I, J, K), ATR et ATI désignant respectivement leur partie réelle et leur partie imaginaire.
- Après la lecture des caractéristiques de différentes représentations irréductibles, les coefficients $B_{l\mu, l'\mu'}^{ii'}$ sont calculés; ils sont désignés par BR (I, J, K) et BI (I, J, K) (partie réelle et partie imaginaire).
- Les termes diagonaux, complémentaires des $B_{l\mu, l\mu}^{ii'}$, déterminés à l'aide des dérivées logarithmiques et désignés par TD (I, J) sont ajoutés aux termes diagonaux correspondants.
- Le déterminant est ensuite calculé en utilisant une méthode de triangulation par pivot minimum.

VI.3 - PRATIQUE DU CALCUL

Pour chaque valeur de $\vec{k}$ et pour chaque représentation irréductible, j'ai évalué le déterminant en utilisant un pas très voisin de 0,5 eV pour les énergies. Le pas a du être réduit à la moitié soit 0,25 eV, ou plus, lorsque la variation du déterminant est brusque au voisinage de son zéro; ceci est le cas lorsque le zéro

du déterminant se situe au voisinage de l'énergie de l'électron libre. Par interpolation il est donc possible de déterminer les niveaux avec une précision de 0,050 eV et le cas échéant, en diminuant le pas, on peut atteindre une précision de l'ordre de 0,010 eV.

Dans la figure VI.1, je donne un exemple de variation des déterminants correspondant aux représentations irréductibles Γ_1 et Γ_{15} en $k = 0$.

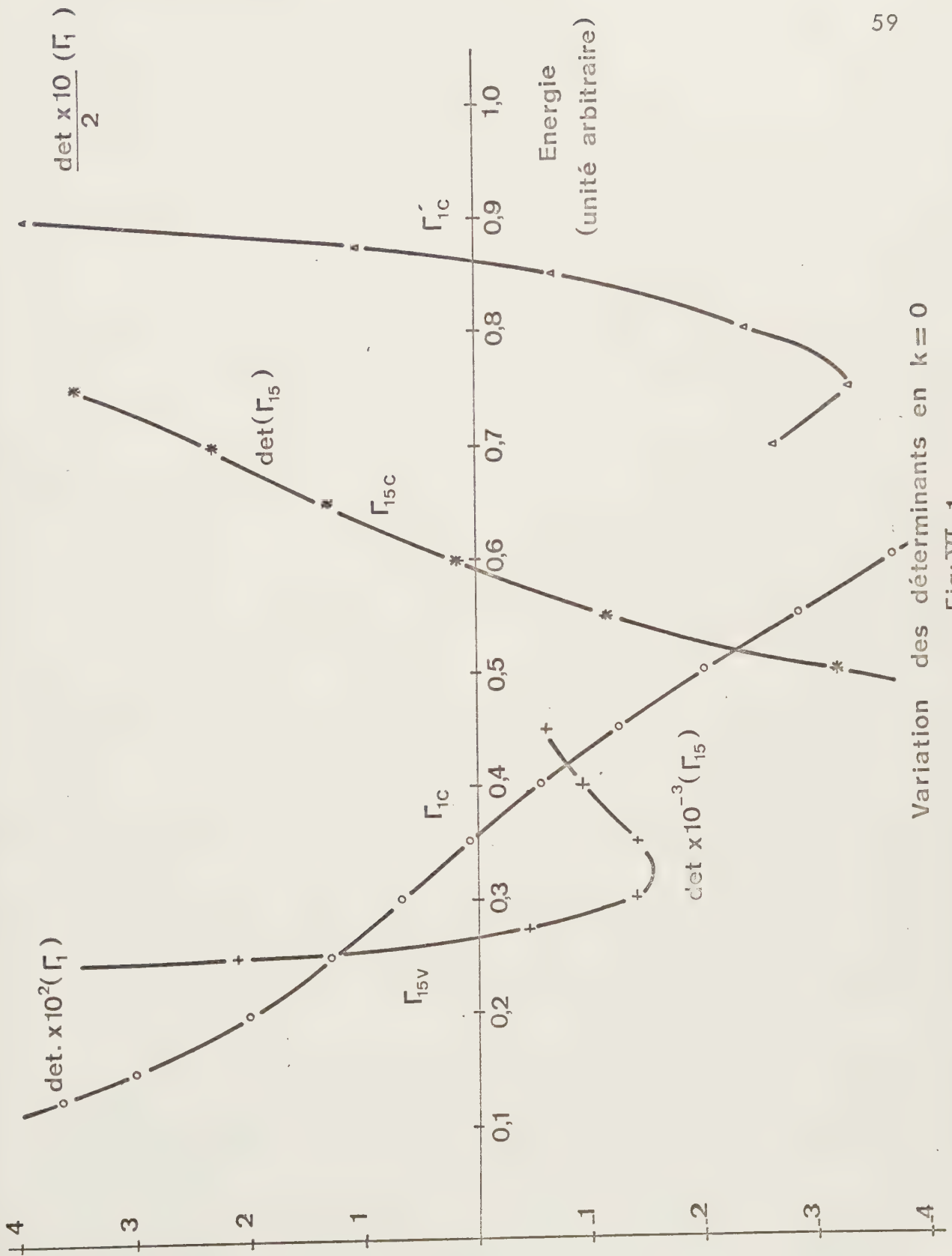
Variation des déterminants en $k=0$

Fig: VI-1

Chapitre VII

RESULTATS SUR LA STRUCTURE DE BANDE DU Ga Sb

VII.1 - RESULTATS

En prenant comme origine des énergies l'énergie du niveau Γ_{15V} , haut de la bande de valence, les énergies, mesurées en eV, des niveaux correspondant aux points de haute symétrie de la zone de Brillouin sont données dans le tableau ci-dessous.

Γ_{15V}	Γ_{1C}	Γ_{15C}	Γ'_{1C}	L_{3V}	L_{1C}	L_{3C}	L'_{1C}
0	0,95	3,40	6,17	- 0,89	1,02	4,27	6,79
X_{5V}	X_{1C}	X_{3C}		K_{2V}	K_{1C}	K_{2C}	K'_{1C}
- 2,14	1,25	1,61		- 1,73	1,48	7,0	7,07

Les variations d'énergie des niveaux dans les directions remarquables sont données sur la figure VII.1. Ces résultats sont en liaison étroite avec les valeurs de l'énergie des niveaux de l'électron libre ($V(\vec{r}) = Cte$) représentées sur la figure VII.2.

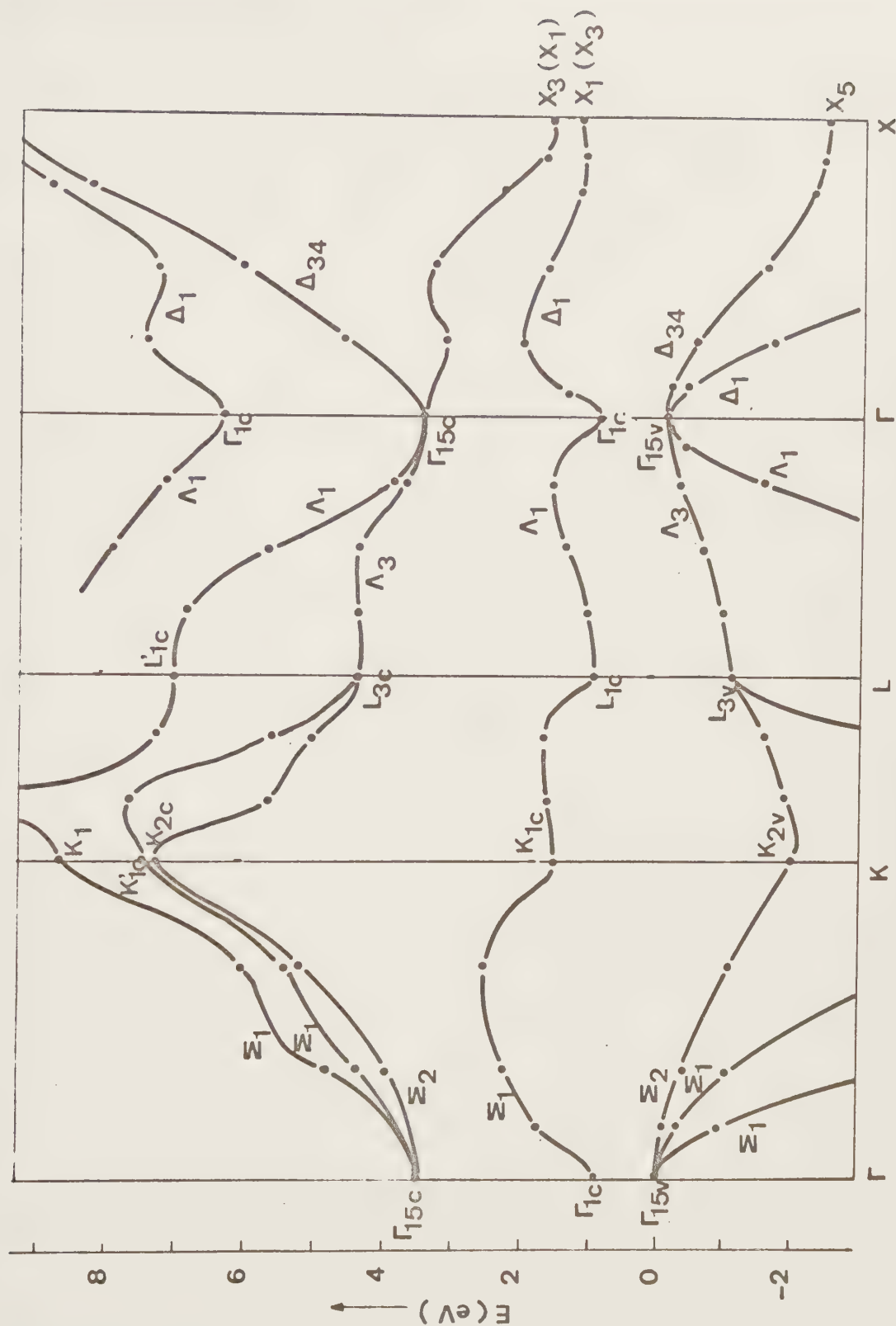


Fig. VII-1. Structure de bande calculée de Ga Sb

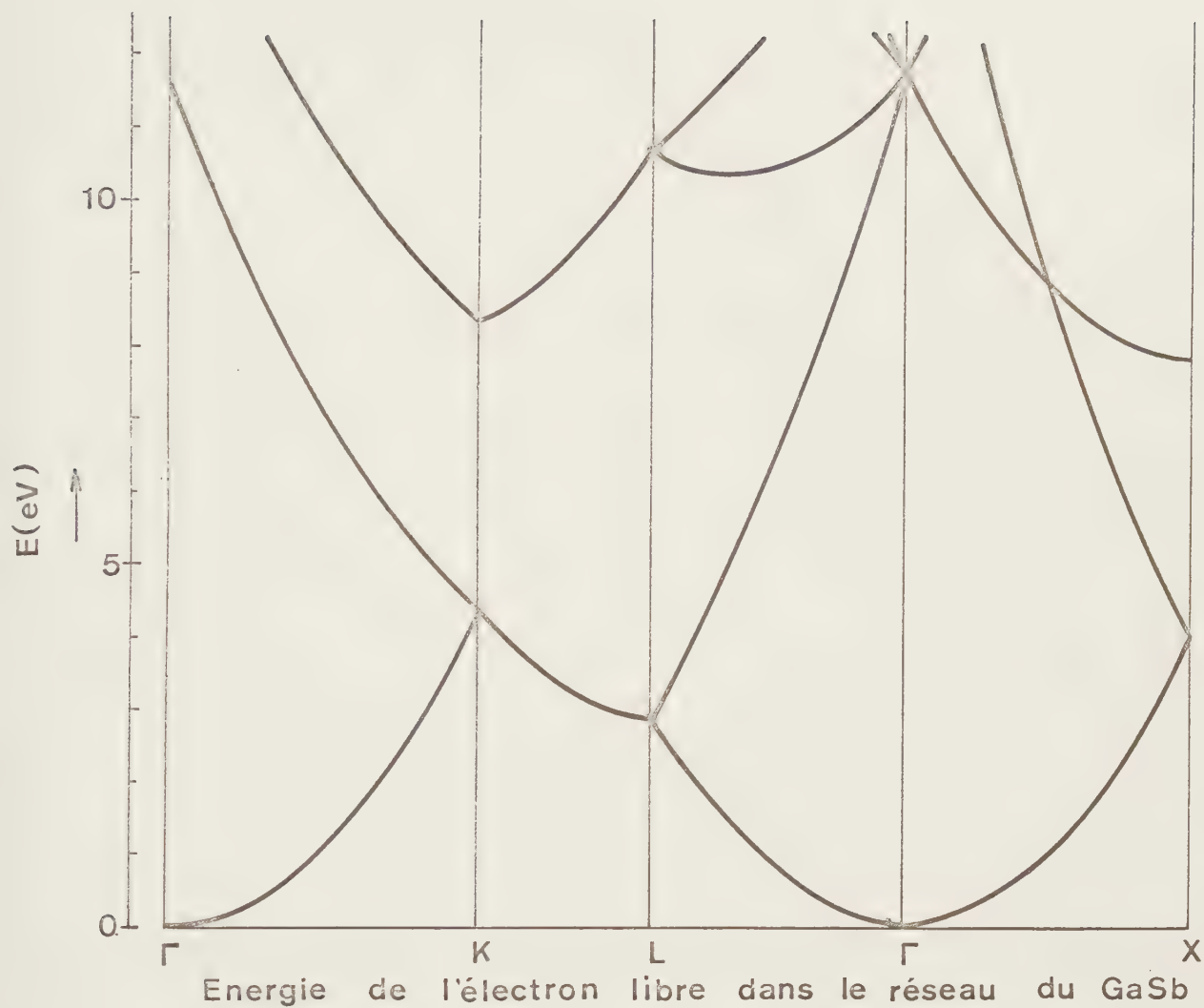


Fig:VII.2

VII.2 - COMPARAISON AVEC LES DONNEES EXPERIMENTALES

Les valeurs suivantes, sauf indication, sont celles obtenues à la température ambiante.

VII.2.1 - Données expérimentales (avec spin-orbite)

- Données sur le gap E_o . Des mesures d'absorption optique effectuées par A.K. Ramdas et H.Y. Fan [16] ont permis de déterminer la valeur de gap $E_o = 0,725$ eV.
- Données sur $L_{6C} - \Gamma_{6C}$. Les mesures faites par A. Sagar [17] : effet Hall et conductivité avec et sans pression hydrostatique et variation de résistivité due à une contrainte uniaxiale; les mesures faites par H.B. Harland et J.C. Woolley [18] , sur la magnétorésistance transversale et l'effet Hall et celles que j'ai effectuées, à partir de l'effet Faraday des porteurs libres, de réflectivité infra-rouge et d'effet Hall donnent, pour la position du minimum de bande L_{6C} par rapport au minimum absolu Γ_{6C} de la bande de conduction, une valeur comprise entre 75 et 100 meV.
- Données sur $X_{6C} - \Gamma_{6C}$. B. B. Kosicki et Al. [19] par des mesures de piezorésistance et d'effet Hall sur du Ga Sb dopé au soufre ont déterminé une valeur minima de 0,26 eV pour la distance $X_{6C} - \Gamma_{6C}$. Ce résultat est en concordance avec la valeur que proposent H. Ehrenreich [20] et W. Paul [21], c'est à-dire une valeur comprise entre 0,3 et 0,4 eV.
- Résultats des mesures d'électroréfectivité par M. Cardona et Al.

Les pics dans le spectre sont attribués à des transitions directes interbandes en des points de l'espace des $\vec{k}$ où la densité d'états combinés des deux branches possède une singularité, soit $\overrightarrow{\text{grad}}_{\vec{k}}(E_i - E_j) = 0$, si l'élément de matrice optique entre les deux états combinés n'est pas nul. Ces conditions sont vérifiées en particulier aux points de haute symétrie de la zone de Brillouin (Γ, X, L, K).

La détermination de l'énergie des points critiques à partir des pics d'électroréfectivité nécessite une analyse complète de Kramers-Krönig. En fait les positions en énergie des points critiques sont très voisines de celles des pics d'électroréfectivité.

Les mesures d'électroréflexivité de M. Cardona et Al. montrent des pics pour les valeurs suivantes de l'énergie: 1,52; 2,03; 2,49; 2,75; 3,27; 3,56; 3,85; 4,20; 4,57 et 5,60 eV. L'interprétation proposée par M. Cardona et Al. est donnée au paragraphe V.3.4. Les pics à 2,75; 3,85 et 5,6 eV n'ont pas reçu d'interprétation.

VII.2.2 - Interprétation des résultats expérimentaux (sans spin-orbite).

Confrontation avec les résultats de M. Cardona.

$$- \Gamma_{1C} - \Gamma_{15V} = E_0 + \frac{\Delta_0}{3} = 0,99 \text{ eV}$$

- Je n'ai pas adopté l'interprétation de Cardona en ce qui concerne les pics à 3,27 et 3,56 eV. J'ai supposé que ces pics correspondaient à des transitions en $k = 0$ entre Γ_{7C} et Γ_{7V} d'une part et Γ_{8C} et Γ_{8V} d'autre part, ce qui permet de déduire (cf. schéma (c) de la figure V.3)

$$\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V} = 3,44 \text{ eV}$$

Les résultats précédents m'ont servi à déterminer les paramètres $\overline{\Delta V}_0$ et $\overline{\Delta V}_1$; plus précisément j'ai choisi $\Gamma_{1C} - \Gamma_{15V} = 0,95 \text{ eV}$ et $\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V} = 3,40 \text{ eV}$.

- L'amplitude des pics à 2,02 et 2,49 eV attribués à E_1 et $E_1 + \Delta_1$ laisse supposer que les branches Λ_{1C} et Λ_{3V} sont à peu près parallèles; aussi peut-on admettre que la valeur de l'écart entre les deux branches en L est assez voisine de celle en Λ , ce qui permet de déduire

$$L_{1C} - L_{3V} \simeq E_1 + \frac{\Delta_1}{2} = 2,26 \text{ eV}.$$

Sur la figure VII.1, le parallélisme entre les deux branches Λ_{1C} et Λ_{3V} est visible.

- Au point X , Cardona propose, pour les transitions E_2 , $E_2 + \delta$ les valeurs des énergies correspondantes aux pics à 4,20 et 4,57 eV, ce qui conduit, la structure fine de X_{5V} n'étant pas résolue, à

$$X_{1C} - X_{5V} = 4,20 \text{ eV}$$

$$X_{3C} - X_{5V} = 4,57 \text{ eV}$$

$$X_{3C} - X_{1C} = 0,37 \text{ eV}$$

Il est possible de donner une interprétation différente en choisissant les pics correspondant à 3,85 et 4,20 eV pour les transitions E_2 et $E_2 + \delta$; ceci conduit à

$$X_{1C} - X_{5V} = 3,85 \text{ eV}$$

$$X_{3C} - X_{5V} = 4,20 \text{ eV}$$

$$X_{1C} - X_{3C} = 0,35 \text{ eV}$$

Ces valeurs sont plus proches des valeurs correspondantes que je détermine 3,39 ; 3,75 et 0,36 eV.

- Dans le cadre de cette hypothèse, le pic à 4,57 eV peut être interprété comme provenant de la transition $L_{4C} - L_{4V}$, qui conduit, avant séparation par le couplage spin-orbite, et, en négligeant l'éclatement du niveau L_{3C} , à

$$L_{3C} - L_{3V} = 4,57 + \frac{\Delta_1}{2} = 4,80 \text{ eV}$$

Cette valeur est à rapprocher de celle que j'ai calculée : 5,16 eV.

- Le dernier pic au voisinage de 5,6 eV peut s'identifier soit avec la transition $\Gamma'_{6C} - \Gamma_{8V}$ qui donne $\Gamma'_1 - \Gamma_{15V} = 5,6 + \frac{\Delta_0}{3} = 5,87 \text{ eV}$, soit avec $L'_{6C} - L_{6C}$ qui donne $L'_{1C} - L_{1C} = 5,6 \text{ eV}$, valeurs à rapprocher avec celles, respectives, que j'ai calculées : $\Gamma'_1 - \Gamma_{15V} = 6,17 \text{ eV}$ et $L'_{1C} - L_{1C} = 5,77 \text{ eV}$.

Notons que cette dernière transition ne devrait pas être observée sur des

échantillons de type (p).

Confrontation avec les autres résultats

Les branches Δ_1 et Λ_1 du bas de la bande de conduction étant simples, l'effet du couplage spin-orbite ne perturbera pas la position relative de ces niveaux.

Je détermine par le calcul $L_{1C} - \Gamma_{1C} = 67 \text{ meV}$ et $X_{1C} - \Gamma_{1C} = 0,30 \text{ eV}$, valeurs qui sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Nous devons noter que, suivant la direction Δ , le calcul fait apparaître un minimum de cette branche à 87% environ de la valeur $\vec{k}$ correspondant au point X, d'énergie très voisine ($\sim 5 \text{ meV}$) de celle du point X.

VII.3 - COMPARAISON AVEC D'AUTRES RESULTATS THEORIQUES

Trois calculs de bande ont été effectués sur le Ga Sb, à ma connaissance, à partir de la méthode O.P.W et d'une méthode de pseudo-potentiel.

- F. Herman, R.L. Kortum, C.D. Kuglin et J.L. Shay [22] (méthode HKKS) ont utilisé comme potentiel d'essai un potentiel construit à partir des potentiels atomiques de chacun de deux atomes perturbé par trois paramètres empiriques ajustés sur les valeurs expérimentales de $\Gamma_{1C} - \Gamma_{15V}$, $L_{1C} - \Gamma_{1C}$ et $\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V}$ soient:

$$\Gamma_{1C} - \Gamma_{15V} = 0,99 \text{ eV} ; \quad L_{1C} - \Gamma_{1C} = 1,07 \text{ eV} ; \quad \Gamma_{15C} - \Gamma_{15V} = 2,93 \text{ eV} .$$

Le calcul a été développé à l'aide de la méthode O.P.W.

- M.L. Cohen et T.K. Bergstresser [23] (méthode C.B.) d'une part et H.I. Zhang et J. Callaway [24] d'autre part (méthode Z.C.) ont utilisé: les premiers un pseudo-potentiel local (indépendant de $\vec{k}$) à six paramètres, les seconds un pseudo-potentiel non local (dépendant de $\vec{k}$) à douze paramètres.

Tous ces paramètres ont été déterminés empiriquement pour faire coïncider certaines valeurs des distances entre niveaux avec les valeurs expérimentales correspondantes, ces valeurs étant prises aux très basses températures. Cependant les valeurs expérimentales varient relativement peu en fonction de la température; ces variations entre 0°K et 300°K sont de l'ordre de 0,1 eV au maximum pour (E_o), et de 0,010 eV pour $L_{1C} - \Gamma_{1C}$.

Un résumé de l'étude comparative de mes résultats (colonne K.R) avec les valeurs expérimentales possibles le cas échéant et celles calculées à l'aide des trois méthodes indiquées plus haut est donné dans le tableau VII.1. Dans ce tableau, j'ai donné deux séries de valeurs pour la méthode H.K.K.S., l'une correspondante à la valeur $\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V} = 2,93$ eV et l'autre correspondante à $\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V} = 3,40$ eV. Pour cette dernière valeur, qui n'a pas été choisie par les auteurs comme valeur finale, seuls quelques résultats ont été disponibles.

Mes résultats sont en bonne concordance avec ceux de Z.C.. Il y a aussi un bon accord avec ceux de H.K.K.S..

Il faut noter le désaccord entre certains résultats de C.B. avec les valeurs expérimentales correspondantes, notamment la distance entre les deux minima principaux de la bande de conduction : 0,80 à comparer avec 0,080 eV.

VII.4 - MASSES EFFECTIVES

Il est souhaitable de déterminer directement les masses effectives des différents types de porteurs en étudiant la concavité de la courbe $E = E(k)$ sur les différentes branches.

En utilisant les unités atomiques et en supposant les bandes paraboliques, ces masses effectives m^* sont données par la relation

$$\frac{m^*}{m_e} = \frac{(\Delta k)^2}{E(k + \Delta k) - E(k)} \quad (\text{VII.4.1})$$

	K.R.	Valeurs exp. ou possibles	H.K.K.S.	H.K.K.S.	Z.C.	C.B.
$\Gamma_1 - \Gamma_{15V}$	0.95	0.99	0.99	0.99	0.91	0.74
$\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V}$	3.40	3.44 ; 2.93 3.73 ; 4.01	2.93	3.40	4.22	4.39
$\Gamma'_1 - \Gamma_{15V}$	6.17	5.87	7.15			
$L_{1C} - \Gamma_1$	0.067	0.080; 0.100	0.080	0.080	0.080	0.80
$L_{3C} - L_{1C}$	3.25		3.06		3.61	3.37
$L_{1C} - L_{3V}$	1.91	2.26	2.12	1.92	1.99	2.33
$L'_{1C} - L_{1C}$	5.77	5.6	5.6			
$L_{3C} - L_{3V}$	5.16	4.80	5.18		5.60	5.70
$X_1 - \Gamma_1$	0.30	0.30	0.51		0.31	1.27
$X_1 - X_3$	0.36	0.37 ; 0.35	0.88	0.34	0.39	0.44
$X_1 - X_5$	3.39	4.20 ; 3.85	3.53	3.46	3.85	3.82

Tableau VII.1
Etude comparative des résultats

Cette méthode peut s'appliquer relativement bien lorsque les masses effectives sont importantes, soit $\frac{m^*}{m_e} > 0,5$, car, dans ce cas, la concavité varie peu pour des variations relativement importantes de $\vec{k}$. Lorsque $\frac{m^*}{m_e}$ devient faible, il faut alors choisir un Δk petit et le résultat des calculs est assez illusoire. Dans ce dernier cas, j'utiliserai la méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$. [25].

VII.4.1 - Détermination de m^* par l'étude de la concavité de $E(k)$

Il est possible d'utiliser cette méthode pour la détermination de la masse longitudinale de L_{1C} , en Δ_1 , et la masse des trous lourds. Les résultats sont résumés dans le tableau suivant à côté des valeurs expérimentales

	Calcul	Expérience
$\frac{m_l^*}{m_e} (L_{1C})$	1,6	
$\frac{m_l^*}{m_e} (\Delta_1)$	1,25	
$\frac{m_{hh}^*}{m_e} (\Gamma_{15V})$	0,50	0,36 [26]

Notons de plus, que la masse expérimentale 0,36 est celle de Γ_{8V} ; l'éclatement de Γ_{15V} par couplage spin-orbite rend difficile la comparaison de ces deux valeurs.

VII.4.2 - Détermination de m^* à l'aide de la méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$

L'équation de Schrödinger :

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (\text{VII.4.2})$$

peut s'écrire en posant $\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} u_{nk}(\vec{r})$, où $u_{nk}(\vec{r})$ possède la périodicité de $V(\vec{r})$,

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] u_{nk}(\vec{r}) = E_n(\vec{k}) u_{nk}(\vec{r}) \quad (\text{VII.4.3})$$

Pour une valeur quelconque de $\vec{k}$, l'ensemble des fonctions u_{nk} est complet pour les fonctions ayant la périodicité de $V(\vec{r})$; on peut donc développer u_{nk} suivant

$$u_{nk}(\vec{r}) = \sum_{n'} C_{n'n}(\vec{k} - \vec{k}_o) u_{n'k_o}(\vec{r}) \quad (\text{VII.4.4})$$

L'équation (VII.4.3) devient donc

$$\sum_{n'} \left[\left\{ E_n(\vec{k}_o) + \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 - k_o^2) \right\} \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m} (\vec{k} - \vec{k}_o) \cdot \vec{p}_{nn'} \right] C_{n'n} = E_n(\vec{k}) C_{nn} \quad (\text{VII.4.5})$$

avec

$$\vec{p}_{nn'} = \int_{\tau} u_{nk_o}^*(\vec{r}) \vec{p} u_{n'k_o}(\vec{r}) d\vec{r}$$

Si $\vec{k}_o$ est un extremum pour $E(\vec{k})$ et si le niveau n n'est pas dégénéré en $\vec{k}_o$, en choisissant le système d'axes principaux, $E_n(\vec{k})$ peut s'écrire sous la forme

$$E_n(\vec{k}) = E_n(\vec{k}_o) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1,3} \frac{(k_i - k_{oi})^2}{m_i} \quad (\text{VII.4.6})$$

avec

$$\frac{1}{m_i} = \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{n'} \frac{|\vec{i} \cdot \vec{p}_{nn'}|^2}{E_n(\vec{k}_o) - E_{n'}(\vec{k}_o)}$$

où $\vec{i}$ est un vecteur unitaire du repère principal.

Ainsi il est nécessaire, pour appliquer la méthode, de connaître les éléments de matrice de $\vec{p}$ reliant les différents niveaux en $\vec{k}_0$.

M. Cardona [27] a proposé une méthode permettant d'ignorer les éléments de matrice pour les composés III.V en les remplaçant par les éléments de matrice du composé IV.IV isoélectronique correspondant; cette méthode est basée sur le fait que les énergies électroniques des composés III.V peuvent être obtenues à partir des énergies correspondantes du composé IV.IV isoélectronique correspondant à l'aide d'un potentiel perturbateur antisymétrique.

- En tenant compte de l'effet des niveaux Γ_{15C} et Γ_{15V} sur le niveau Γ_{1C} la masse effective en Γ_{1C} est donnée par

$$\frac{m_e}{m^*(\Gamma_{1C})} = 1 + \frac{p^2}{2 [E_p(\Gamma_{15C}) - E_p(\Gamma_{15V})]} \times$$

$$\left[\frac{E_p(\Gamma_{15C}) - E_p(\Gamma_{15V}) + E(\Gamma_{15}) - E(\Gamma_{25'})}{3} \times \left(\frac{2}{E_{op}} + \frac{1}{E_{op} + \Delta_o} \right) \right.$$

$$\left. - \frac{E_p(\Gamma_{15C}) - E_p(\Gamma_{15V}) - E(\Gamma_{15}) + E(\Gamma_{25'})}{E_p(\Gamma_{15C}) - E_p(\Gamma_{15V}) - E_{op}} \right] \quad (VII.4.7)$$

L'indice p correspond au composé III.V étudié et les niveaux Γ_{15} et $\Gamma_{25'}$ sont les niveaux du composé IV.IV correspondant, et on a:

$$p^2 = \frac{2}{3m} |\langle \psi_{\Gamma_{25'}} | \vec{p} | \psi_{\Gamma_{15}} \rangle|^2 \quad (VII.4.8)$$

Dans l'équation (VII.4.7) on a négligé l'interaction spin-orbite en Γ_{15C} et on a supposé que l'élément de matrice était le même pour les niveaux, éclatés par effet spin-orbite, correspondant à Γ_{15V} .

. Des formules équivalentes peuvent être déterminées pour les niveaux L_{1C} et Δ_1 .

. La bande de valence en $k = 0$ admet des développements de la forme

$$\frac{2 m E}{\hbar} = A k^2 + \left[B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) \right]^{1/2} \quad (\text{VII.4.9})$$

$$\frac{2 m E}{\hbar} = A' k^2 - \Delta_0$$

A, B, C, A' sont des constantes que l'on peut calculer à partir d'éléments de matrice P, Q, G caractéristiques du composé IV.IV. Ces éléments de matrice variant peu en fonction de l'énergie, on utilise ceux déterminés pour le germanium. $P^2 = 23 \text{ eV}$, $Q^2 = 15,5 \text{ eV}$, $G = 1,6 \text{ eV}$.

Dans le tableau suivant je donne les caractéristiques des bandes du germanium et de l'étain α . Puisque l'on passe d'une façon continue des bandes de l'un de ces composés à l'autre, il est supposé que le composé isoélectronique IV.IV correspondant à Ga Sb aura des caractéristiques de bandes moyennes de celles de Ge et de $\alpha \text{ Sn}$.

	$\Gamma_{15} - \Gamma_{25'}$	$L'_3 - L_1$	$L'_3 - L_3$	$X_4 - X_1$
Ge	3,15	2,1	5,7	4,3
$\alpha \text{ Sn}$	2,9	1,4	4,2	3,5

Dans le tableau suivant je donne les valeurs des masses effectives des porteurs déterminées en utilisant cette méthode. Les valeurs expérimentales y sont également portées.

	Valeurs calculées	Valeurs expérimentales
$m^* (\Gamma_1)$	0,040	0,048 [28]
$m^*_{lh} (\Gamma_{15})$	0,043	0,052 [26]
$m^*_{hh} (\Gamma_{15})$	0,67	0,36 [26]
$m^*_{sh} (\Gamma_{15})$	0,11	—
$m^*_t (L_1)$	0,124	—

VII.5 - CONCLUSION

Dans l'ensemble des valeurs expérimentales que j'ai utilisées, il faut séparer deux groupes, un groupe qui ne prête pratiquement à aucune difficulté d'interprétation et un groupe de résultats qui ne peuvent, à l'heure actuelle, être interprétés parfaitement par la théorie. Dans le premier groupe il faut placer les résultats utilisant des phénomènes de transport et la détermination des masses effectives par résonance cyclotron, effet Faraday, et une partie des résultats d'électroréflexivité. Dans le deuxième groupe doivent se placer la plupart des résultats d'électroréflexivité. Ces derniers résultats peuvent donner lieu à des interprétations possibles sans plus. Si j'ai choisi 3,40 eV comme distance $\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V}$, c'est que cette valeur pouvait expliquer trois pics du spectre d'électroréflexivité sans trop perturber le potentiel initial déterminé théoriquement.

Si on compare les résultats de F. Herman et Al. disponibles avec le même choix de $\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V} = 3,40\text{eV}$, on obtient le tableau suivant:

	$\Gamma_1 - \Gamma_{15V}$	$\Gamma_{15C} - \Gamma_{15V}$	$L_{1C} - \Gamma_1$	$L_{1C} - L_{3V}$	$X_1 - X_3$	$X_1 - X_5$
H.K.K.S.	0,99	3,40	0,080	1,92	0,36	3,39
K. R.	0,95	3,40	0,067	1,91	0,34	3,46

La concordance est remarquable pour ces niveaux disponibles.

Ainsi les deux méthodes, totalement différentes dans leurs principes donnent des résultats pratiquement équivalents.

La méthode de Kohn-Rostoker, à l'aide de quelques ajustements empiriques permet donc d'obtenir des résultats en très bon accord avec des méthodes où le choix du potentiel est moins restrictif et ceci pour des composés dont les atomes possèdent une liaison covalente importante tel que le Ga Sb. Jusqu'à ce jour, la méthode K.R. a été utilisée avec succès pour les métaux et pour les alcalins et quelques semiconducteurs [29]. Pour les composés III.V les résultats étaient d'autant meilleurs que la liaison possédait un degré d'ionicté plus important [30]. Pour le Ga Sb et le germanium les résultats étaient nettement mauvais puisque le calcul donnait une structure métallique.

DEUXIEME PARTIE

ETUDE EXPERIMENTALE DE LA BANDE DE CONDUCTION

DE L'ANTIMONIURE DE GALLIUM

L'existence d'un deuxième minimum d'énergie de la bande de conduction voisin du minimum absolu de cette bande peut être facilement mis en évidence. Pour un échantillon de type n , le coefficient de Hall augmente avec la température alors que dans les mêmes conditions, la rotation Faraday diminue. Ceci peut s'expliquer par le fait que le premier minimum de la bande de conduction se dépeuple au profit d'un second minimum voisin dans lequel les électrons ont une mobilité plus faible et une masse effective plus grande.

A. Sagar [17] qui a postulé l'existence de ce deuxième minimum propose 0,075 eV comme séparation en énergie $\Delta E = E_2 - E_1$ entre les deux minima à la température ambiante et un coefficient de température de $-3 \cdot 10^{-4}$ eV/°K. Ce dernier résultat est en contradiction avec ceux de H. Piller [28] qui par l'étude simultanée de l'effet Faraday et de l'effet Hall déduit la masse effective des deux types de porteurs et le coefficient de température de ΔE soit $+1,1 \cdot 10^{-4}$ eV/°K. Ces derniers résultats ont été obtenus, en supposant le nombre de porteurs total indépendant de la température ainsi que le rapport de mobilité $\frac{\mu_2}{\mu_1}$ des deux types de porteurs, et en utilisant les valeurs de ΔE et $\frac{\mu_2}{\mu_1}$

déterminées par A. Sagar à la température ambiante.

H.B. Harland et J.C. Woolley [18] par des mesures d'effet Hall et de magnétorésistance ont déterminé les valeurs de ΔE en fonction de la température. Ils trouvent pour ΔE un coefficient de température positif soit : $0,81 \cdot 10^{-4} \text{ eV/}^\circ\text{K}$ et montrent que le nombre total de porteurs et que le rapport de mobilité varient de façon importante avec la température.

C.Y. Liang, H. Piller et D.L. Stierwalt [31] et C.Y. Liang [32] en utilisant des mesures simultanées de rotation Faraday, d'effet Hall et de réflectivité, ont, en utilisant la valeur de ΔE de Harland et Woolley à 77°K , déterminé la masse effective du deuxième type de porteurs et la variation de ΔE avec la température (coefficient de température: $0,59 \cdot 10^{-4} \text{ eV/}^\circ\text{K}$). Ils montrent cependant que le nombre total de porteurs est indépendant de la température. De même les rapports de mobilité à 77°K et à 293°K sont nettement différents de ceux déterminés par Harland et Woolley pour un échantillon équivalent.

Ainsi, chaque détermination de caractéristiques a nécessité, soit un certain nombre d'hypothèses, soit des résultats déterminés à l'aide d'hypothèses. Dans tous les cas, les résultats finaux ont infirmé soit les hypothèses de départ, soit une partie des résultats utilisés.

Il faut noter aussi la détermination de ΔE par W.M. Becker, A.K. Ramdas et H.Y. Fan [33] qui donnent une valeur de $0,080 \text{ eV}$ à $4,2^\circ\text{K}$.

« »

Je vais dans cette deuxième partie étudier le premier minimum de la bande de conduction dans un cas où il est certain que le nombre et l'effet des porteurs du deuxième minimum sont négligeables. Cette hypothèse est justifiée à basse température (20°K) dans le cas d'un échantillon relativement peu dopé : ($3 \cdot 10^{17} / \text{cm}^3$). L'étude simultanée de l'effet Faraday, de l'effet Hall et de la

conductivité permettra la détermination de la masse effective et de la mobilité des électrons. J'étudierai auparavant l'effet Faraday sur un échantillon de type p pour connaître l'effet des transitions interbandes au voisinage du gap (chapitre X).

Dans le chapitre XI , à l'aide de mesures simultanées d'effet Faraday, d'effet Hall, de réflectivité et de conductivité sur deux échantillons de dopage différent, je déterminerai le maximum possible de caractéristiques du deuxième minimum de la bande de conduction.

Chapitre VIII

RAPPELS THEORIQUES SUR L'EFFET FARADAY ,

LA REFLECTIVITE INFRAROUGE ET L'EFFET HALL

VIII.1 - EFFET FARADAY

VIII.1.1 - INTRODUCTION

L'effet Faraday consiste en la rotation du plan de polarisation d'une onde plane polarisée rectilignement traversant un milieu soumis à un champ magnétique parallèle au vecteur de Poynting de la radiation. L'onde transmise est en général polarisée elliptiquement et son axe principal aura subi une rotation par rapport au plan de polarisation de l'onde incidente.

L'onde plane polarisée rectilignement peut se décomposer en deux ondes planes polarisées circulairement en sens contraire. Soit n_+ et n_- les parties réelles des indices complexes correspondant à ces deux vibrations, la rotation Faraday, par unité de longueur et pour la pulsation ω , est donnée par

$$\theta(\omega) = [n_+(\omega) - n_-(\omega)] \frac{\omega}{2c} \quad (\text{VIII.1.1})$$

c est la vitesse de la lumière. Le sens de la rotation est celui de la vibration circulaire avancée.

VIII.1.2 - Formulation à l'aide de la conductivité

L'équation de propagation du champ électrique alternatif de pulsation ω dans un milieu non magnétique de perméabilité μ_0 égale à celle du vide et de permittivité électrique ϵ ($\epsilon = \chi \epsilon_0$, ϵ_0 étant la permittivité du vide) est

$$-\Delta \vec{E} + \text{grad div } \vec{E} = \omega^2 \epsilon \mu_0 \vec{E} - i \omega \mu_0 \vec{\sigma} \cdot \vec{E} \quad (\text{VIII.1.2})$$

$\vec{\sigma}$ est le tenseur de conductivité en présence du champ magnétique.

En posant $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{(i\omega t - \vec{\Gamma} \cdot \vec{r})}$ on obtient

$$-\Gamma^2 \vec{E} + \vec{\Gamma}(\vec{\Gamma} \cdot \vec{E}) = \omega^2 \epsilon \mu_0 \vec{E} - i \omega \mu_0 \vec{\sigma} \cdot \vec{E} \quad (\text{VIII.1.3})$$

En prenant $\vec{\Gamma}$ et $\vec{B}$ suivant Oz et en supposant le milieu isotrope, c'est-à-dire

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{xy} &= -\sigma_{yx} = \sigma \\ \sigma_{xx} &= \sigma_{yy} = \sigma' \end{aligned} \right\} \quad (\text{VIII.1.4})$$

on obtient

$$\frac{E_x}{E_y} = \pm i \quad (\text{VIII.1.5})$$

ce qui correspond à la propagation de deux ondes planes polarisées circulairement en sens contraire dont l'équation de propagation est :

$$\Gamma_{\pm}^2 E_{\pm} = -\omega^2 \epsilon \mu_0 E_{\pm} + i \omega \mu_0 \sigma_{\pm} E_{\pm} \quad (\text{VIII.1.6})$$

avec

$$\begin{aligned} E_{\pm} &= E_x \pm i E_y \\ \sigma_{\pm} &= \sigma \pm i \sigma' \end{aligned}$$

Γ est relié à l'indice complexe par

$$\Gamma = \alpha + i\beta = \frac{i\omega}{c} (n - ik)$$

soit

$$\begin{aligned} (n - ik)_{\pm}^2 &= c^2 \epsilon \mu_0 - i \frac{c^2 \mu_0 \sigma_{\pm}}{\omega} \\ (n - ik)_{\pm}^2 &= \chi \left(1 - \frac{i \sigma_{\pm}}{\epsilon \omega} \right) \end{aligned} \quad (\text{VIII.1.7})$$

Si l'on a $\epsilon \omega \gg \sigma_{\pm}$, c'est-à-dire en supposant les courants de conduction faibles par rapport aux courants de déplacement, ce qui est le cas aux fréquences de l'infrarouge proche, on obtient un développement au premier ordre

$$(n - ik)_{\pm} = \sqrt{\chi} \left(1 - \frac{i \sigma_{\pm}}{2 \epsilon \omega} \right)$$

$$\text{soit} \quad \theta(\omega) = -\frac{1}{2c} \frac{\sigma_{xy}}{n(\omega) \epsilon_0} \quad (\text{VIII.1.8})$$

σ_{xy} étant la partie réelle de la conductivité et $n = \sqrt{\epsilon}$

VIII.1.3 - Effet des porteurs libres

a - Cas d'une bande isotrope

Classiquement, il est possible de déterminer le tenseur de conductivité en étudiant le mouvement d'une particule de masse effective m^* isotrope soumise à un champ électrique et une induction magnétique B . Si τ est le temps de relaxation, l'équation du mouvement de la particule s'écrit:

$$m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = e (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) - m^* \frac{\vec{v}}{\tau} \quad (\text{VIII.1.9})$$

En écrivant que le courant est fonction d'une part du champ électrique et d'autre part de la vitesse $\vec{v}$ et du nombre de porteurs, on déduit que

$$\sigma_{xy} = \frac{N e^2}{m^*} \frac{\omega_c}{\left(\frac{1}{\tau} + i\omega\right)^2 + \omega_c^2} \quad (\text{VIII.1.10})$$

où $\omega_c = \frac{e B}{m^*}$ est la pulsation cyclotron et N le nombre de porteurs par unité de volume du cristal.

En négligeant $\frac{1}{\tau}$ devant ω , soit $\omega\tau \gg 1$, et ω_c devant ω , soit $\omega \gg \omega_c$, on obtient, en portant la valeur de σ_{xy} dans (VIII.1.8),

$$\theta(\omega) = \frac{N e^3 B}{2 c n \epsilon_0 m^{*2} \omega^2} = \frac{N e^3 B}{8 \pi^2 c^3 n \epsilon_0} \frac{\lambda^2}{m^{*2}} \quad (\text{VIII.1.11})$$

La conditions $\omega\tau \gg 1$ est facilement réalisée aux longueurs d'onde utilisées ($1 \mu < \lambda < 7 \mu$), de même que $\omega \gg \omega_c$ puisque avec une induction de 5 Wb/m^2 $\lambda_c(\omega_c)$ se situe aux environs de 150μ pour les électrons de masse effective $m^* = 0,048 m_e$.

Il faut faire à ce stade plusieurs remarques.

Remarque 1.- Nous avons ici négligé tous les autres effets pouvant contribuer à la conduction, en particulier les vibrations du réseau pour lesquelles les phénomènes sont importants aux environs de 40μ , de même que les transitions inter-bandes dont les effets sont importants uniquement au voisinage du gap.

Remarque 2.- Un traitement semi-quantique de σ_{xy} ne faisant intervenir que les électrons de conduction [34] donne le même résultat, à la limite des hautes fréquences, que le traitement classique.

Remarque 3 .- L'équation (VIII.1.9) est une approximation de l'équation de Boltzman dans laquelle nous avons supposé l'existence d'une masse isotrope et un temps de relaxation isotrope et ne dépendant pas de l'énergie. Stephen et Lidiard [35] en partant de l'équation de Boltzman ont montré que pour un semiconducteur dégénéré et possédant une surface d'énergie sphérique mais non parabolique, la rotation Faraday est donnée par la relation (VIII.1.11) dans laquelle

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial E}{\partial k} \right)_{E=E_F} \quad (\text{VIII.1.12})$$

La dérivée étant prise au niveau de Fermi E_F .

Pour une bande parabolique, l'expression ci-dessus se réduit à la valeur habituelle de m^* .

b - Cas d'une bande anisotrope

Lorsque la bande est anisotrope, l'expression de σ_{xy} reste identique à (VIII.1.10), en prenant pour m^* la masse cyclotron [37].

Dans le Ga Sb, il y a quatre ellipsoïdes complets correspondant au minimum L_1 de la bande de conduction. Ces ellipsoïdes sont de révolution autour de l'axe ternaire correspondant. (figure VIII.1).

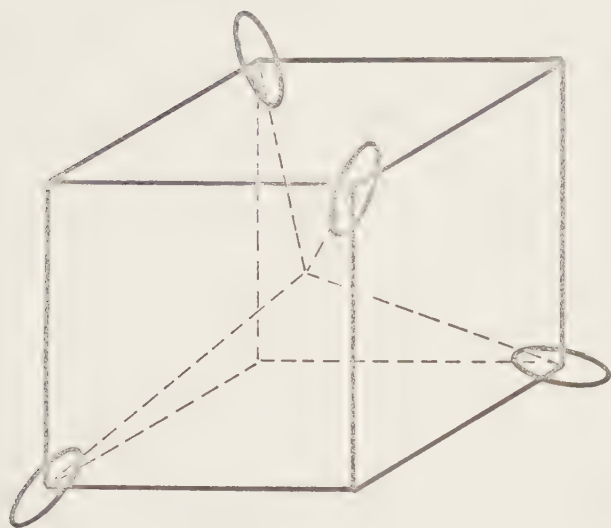


Fig: VIII.1

En supposant que la population N_i des porteurs est la même pour les quatre ellipsoïdes notés 1, 2, 3, 4, on écrit que

$$\frac{N}{m_f^*} = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 \frac{N_i}{m_{ci}^*} \quad (\text{VIII.1.13})$$

avec

$$\sum_i N_i = N$$

m_{ci}^* est la masse cyclotron relative à l'ellipsoïde i .

$$m_{ci}^* = \sqrt{\frac{m_1 m_2 m_3}{\alpha^2 m_1^2 + \beta^2 m_2^2 + \gamma^2 m_3^2}} \quad (\text{VIII.1.14})$$

m_1, m_2, m_3 sont les masses correspondant aux trois axes principaux de l'ellipsoïde et $\alpha^2, \beta^2, \gamma^2$ les cosinus directeurs du support de l'induction $\vec{B}$ par rapport à ces axes.

On peut montrer que m_f^* est indépendant du choix de la direction de $\vec{B}$.

En choisissant l'induction $\vec{B}$ suivant l'axe $\langle 111 \rangle$ ou suivant l'axe $\langle 100 \rangle$, on montre que

$$m_f^* = \sqrt{\frac{3K}{2+K}} m_t \quad (\text{VIII.1.15})$$

avec $K = \frac{m_l}{m_t}$ où m_l correspond à l'axe ternaire.

c - Cas de deux bandes

Les effets étant additifs, si m_{1f}^* et m_{2f}^* sont les masses Faraday des deux types de porteurs de même charge e , et si n_1 et n_2 leurs densités correspondantes, la rotation Faraday sera donnée par

$$\theta(\omega) = \frac{e^3 \lambda^2 B}{4 \pi^2 c^3 n(\omega) \epsilon_0} \left(\frac{n_1}{m_{1f}^{*2}} + \frac{n_2}{m_{2f}^{*2}} \right) \quad (\text{VIII.1.16})$$

VIII.1.4 - Effet des transitions interbandes.

De nombreuses études théoriques sur l'effet Faraday dû aux transitions interbandes ont été faites en utilisant des méthodes semi-classiques et des méthodes quantiques. Les traitements quantiques nécessitent des hypothèses qui doivent, à la limite des grandes longueurs d'onde, donner des résultats équivalents aux théories semi-classiques. Cet accord semble en partie réalisé: on en trouvera l'étude et la bibliographie dans l'article de la revue de J. Halpern, B. Lax et Y. Nishina [38].

Je retiendrai deux résultats seulement:

La rotation n'a pas de point singulier pour la valeur ω de la pulsation correspondant à une transition indirecte.

La rotation a un point singulier pour la pulsation ω_g correspondant à la transition directe entre les deux premiers niveaux de Landau des bandes de conduction et de valence et cet effet est prépondérant au voisinage de ω_g pour $\omega < \omega_g$. Il est alors possible d'utiliser la valeur de la rotation obtenue d'une façon semi-classique soit pour $\omega < \omega_g$

$$\theta_d = \frac{\gamma B}{\omega} (\omega_g - \omega)^{-1/2} \quad (\text{VIII.1.17})$$

VIII.2 - REFLECTIVITE - RESONANCE PLASMA

Je considère ici uniquement l'effet des porteurs libres. En effet, les longueurs d'ondes de la lumière utilisée sont comprises entre 3μ et 30μ . Pour ces longueurs d'ondes, l'effet des transitions interbandes est négligeable et l'effet de polarisation du réseau est supposé indépendant de la longueur d'onde considérée.

Le coefficient de réflexion à l'incidence normale est relié à l'indice complexe du milieu par la relation

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (\text{VIII.2.1})$$

VIII.2.1 - Théorie classique de Drude-Zener

a- Bande isotrope

Considérons un ensemble de N porteurs de charge e , de masse effective isotrope m^* soumis à l'action d'un champ électrique alternatif de pulsation ω et soit τ le temps de relaxation; l'équation du mouvement est

$$m^* \frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{m^*}{\tau} \frac{dx}{dt} = e E e^{i \omega t} \quad (\text{VIII.2.2})$$

en posant $x = X e^{i \omega t}$

on obtient
$$X = \frac{e E}{-m \omega^2 + \frac{i \omega}{\tau}} \quad (\text{VIII.2.3})$$

La polarisabilité électronique est donc

$$p = \frac{eX}{E} = \frac{-e^2}{m \omega^2} \frac{\omega^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} - i \frac{e^2}{m \omega^2} \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (\text{VIII.2.4})$$

La polarisabilité totale sera, si P_a est la polarisabilité atomique (de parties réelle P_a^r et imaginaire P_a^i), et si N est le nombre de porteurs par unité

de volume

$$P = P_a + P_e = P_a + N p$$

or l'indice complexe est relié à la polarisabilité par la relation

$$N = (n + ik) = 1 + \frac{P}{\epsilon_o} \quad (\text{VIII.2.5})$$

Aussi

$$n^2 - k^2 = 1 + \frac{P_a^r}{\epsilon_o} + \left[- \frac{N e^2}{m^* \epsilon_o \omega^2} \left\langle \frac{\omega^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle \right] \quad (\text{VIII.2.6})$$

$$2 n k = \frac{P_a^i}{\epsilon_o} + \frac{N e^2}{m^* \epsilon_o \omega^2} \left\langle \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle$$

En supposant que l'effet de la polarisation des atomes est indépendant de la fréquence dans cette zone on peut écrire $1 + \frac{P_a^r}{\epsilon_o} = \epsilon_\infty$ et on peut négliger $\frac{P_a^i}{\epsilon_o}$ devant le terme correspondant aux électrons libres.

En supposant la bande suffisamment dégénérée, on peut écrire

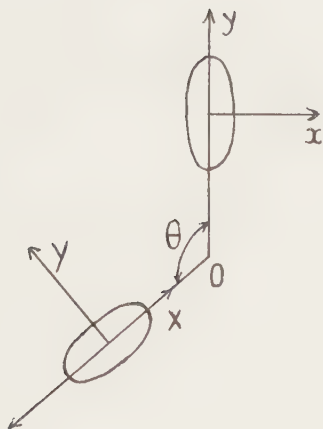
$$\left\langle \frac{\omega^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle \simeq \frac{\omega^2 \langle \tau^2 \rangle}{1 + \omega^2 \langle \tau^2 \rangle} \simeq \frac{\omega^2 \langle \tau \rangle^2}{1 + \omega^2 \langle \tau \rangle^2} \quad (\text{VIII.2.7})$$

et

$$\left\langle \frac{\omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \right\rangle \simeq \frac{\omega \langle \tau \rangle}{1 + \omega^2 \langle \tau \rangle^2}$$

b - Bande anisotrope

En utilisant les mêmes hypothèses que pour l'effet Faraday dans le cas d'une bande anisotrope et en prenant le champ électrique suivant Oy , il suffit,



pour déterminer la masse m_r^* , d'identifier les deux membres de l'expression:

$$\frac{N}{4} \left(\frac{\vec{1}}{m} \right)_y e \vec{E} + \frac{3N}{4} \left(\frac{\vec{1}}{m} \right)_y e \vec{E} = \frac{N e \vec{E}}{m_r^*}$$

(VIII.2.8)

forme:

$$\left(\frac{\vec{1}}{m} \right) = \begin{bmatrix} \frac{1}{m_t} & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_l} \end{bmatrix}$$

Le tenseur de masse du deuxième ellipsoïde dans le système (XY) est de la même forme. Soit S la matrice de passage du système (xy) au système (XY)

$$S = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

L'équation (VIII.2.8) devient

$$\frac{N}{4} \left(\frac{\vec{1}}{m} \right)_y e \vec{E} + \frac{3Ne}{4} \left[S^{-1} \left(\frac{\vec{1}}{m} \right) S \right]_y e \vec{E} = \frac{N e \vec{E}}{m_r^*}$$

soit

$$\frac{N}{4} \frac{eE}{m_l} + \frac{3NeE}{4} \left[\frac{\sin^2 \theta}{m_t} + \frac{\cos^2 \theta}{m_l} \right] = \frac{NeE}{m_r^*}$$

soit

$$m_r^* = \frac{3 K m_t}{1 + 2 K} \quad (\text{VIII.2.9})$$

c- Cas de deux bandes

Les effets sont additifs. Si m_{1r}^* et m_{2r}^* sont les masses optiques des deux types de porteurs et si n_1 et n_2 sont leurs densités respectives, on obtient:

$$n^2 - k^2 = \epsilon_\infty - \frac{e^2}{\epsilon_o \omega^2} \left[\frac{n_1}{m_{1r}^*} \frac{\Omega_1^2}{1 + \Omega_1^2} + \frac{n_2}{m_{2r}^*} \frac{\Omega_2^2}{1 + \Omega_2^2} \right] \quad (\text{VIII.2.10})$$

$$2 n k = \frac{e^2}{\epsilon_o \omega^2} \left[\frac{n_1}{m_{1r}^*} \frac{\Omega_1}{1 + \Omega_1^2} + \frac{n_2}{m_{2r}^*} \frac{\Omega_2}{1 + \Omega_2^2} \right]$$

avec $\Omega_i = \omega \langle \tau_i \rangle$

VIII.3 - EFFET HALL ET CONDUCTIVITE

Dans le cas où deux types de porteurs participent à la conduction, la constante de Hall R_H peut se mettre sous la forme [39]

$$R_H = \frac{\sigma_1^2 R_1 + \sigma_2^2 R_2 + \sigma_1^2 \sigma_2^2 R_1 R_2 H^2 (R_1 + R_2)}{(\sigma_1 + \sigma_2)^2 + \sigma_1^2 \sigma_2^2 H^2 (R_1 + R_2)^2} \quad (\text{VIII.2.11})$$

où σ_i et R_i sont les conductivités et les constantes de Hall de chacun des deux types de porteurs. Dans le cas de faibles champs et pour des bandes dégénérées $\sigma(H) = \sigma(0)$.

La première bande étant sphérique : $R_1 = - \frac{r_1}{n_1 e}$

La deuxième bande étant non sphérique : $R_2 = - \frac{r_2 F}{n_2 e}$

r_1 et r_2 sont des quantités dépendant du mode de relaxation des porteurs et de leur répartition statistique ; F est un facteur d'anisotropie égal à $\frac{3K(K+2)}{(2K+1)^2}$.

En posant :

$$\beta = \frac{n_2}{n_1} \frac{\mu_2}{\mu_1} \quad \alpha = \frac{n_2}{n_1} \quad \gamma = \frac{\mu_1}{\mu_2} \quad \lambda = \frac{r_2}{r_1}$$

$$R_H = \frac{1 + \beta^2 \frac{R_2}{R_1} + \sigma_2^2 R_2 H^2 (R_1 + R_2)}{(1 + \beta)^2 + \sigma_2^2 H^2 (R_1 + R_2)^2} \quad (\text{VIII.2.12})$$

Si on néglige les termes en H^2 (il sera nécessaire de vérifier que R_H ne dépend pas de H dans la zone de H considérée), alors

$$R_H = R_1 \frac{1 + \beta^2 \frac{\lambda F}{\alpha}}{(1 + \beta)^2}$$

soit

$$R_H = \frac{r_1}{n_1 e} \frac{1 + \frac{n_2}{n_1} \left(\frac{\mu_2}{\mu_1} \right)^2 \frac{r_2}{r_1} F}{\left(1 + \frac{n_2}{n_1} \frac{\mu_2}{\mu_1} \right)^2} \quad (\text{VIII.2.13})$$

La conductivité, dans le cas où deux types de porteurs participent au phénomène, est de la forme

$$\sigma = n_1 e \mu_1 + n_2 e \mu_2 \quad (\text{VIII.2.14})$$

avec

$$\mu_i = \frac{e \langle \tau_i \rangle}{m_{ir}^*}, \text{ on peut \acute{e}crire } \sigma \text{ sous la forme}$$

$$\sigma = \frac{n_1}{m_{1r}^*} e^2 \langle \tau_1 \rangle + \frac{n_2 e^2}{m_{2r}^*} \langle \tau_2 \rangle$$

$$\text{ou } \sigma = \frac{e^2}{\omega} \left[\frac{n_1}{m_{1r}^*} \Omega_1 + \frac{n_2}{m_{2r}^*} \Omega_2 \right] \quad (\text{VIII.2.14})$$

Chapitre IX

DETAILS EXPERIMENTAUX

IX.1 - ECHANTILLONS

Les lingots à partir desquels les échantillons ont été découpés ont été obtenus au Centre d'Etudes d'Electronique des Solides de la Faculté des Sciences de Montpellier. Ils ont été obtenus par tirage. Le tellure a servi de dopant pour l'obtention des échantillons de type n .

La même tranche a été utilisée pour l'étude de l'effet Faraday et de la réflectivité. L'effet Hall et la conductivité ont été étudiés sur une tranche adjacente, les deux tranches étant séparées par une fraction de millimètre de façon à réduire les effets d'inhomogénéité.

Les surfaces des tranches utilisées pour l'effet Faraday et la réflectivité ont été polies optiquement. Cependant, pour éviter l'effet des multiples réflexions dans la rotation Faraday, les deux faces des échantillons ont été taillées de telle sorte qu'elles forment entre elles un angle très faible.

Le choix des échantillons est très important. Pour l'étude de la première bande, à basse température, il faut disposer d'un échantillon peu dopé pour éviter le peuplement de la deuxième bande, mais suffisamment dopé cependant pour augmenter la rotation Faraday et obtenir ainsi une meilleure précision.

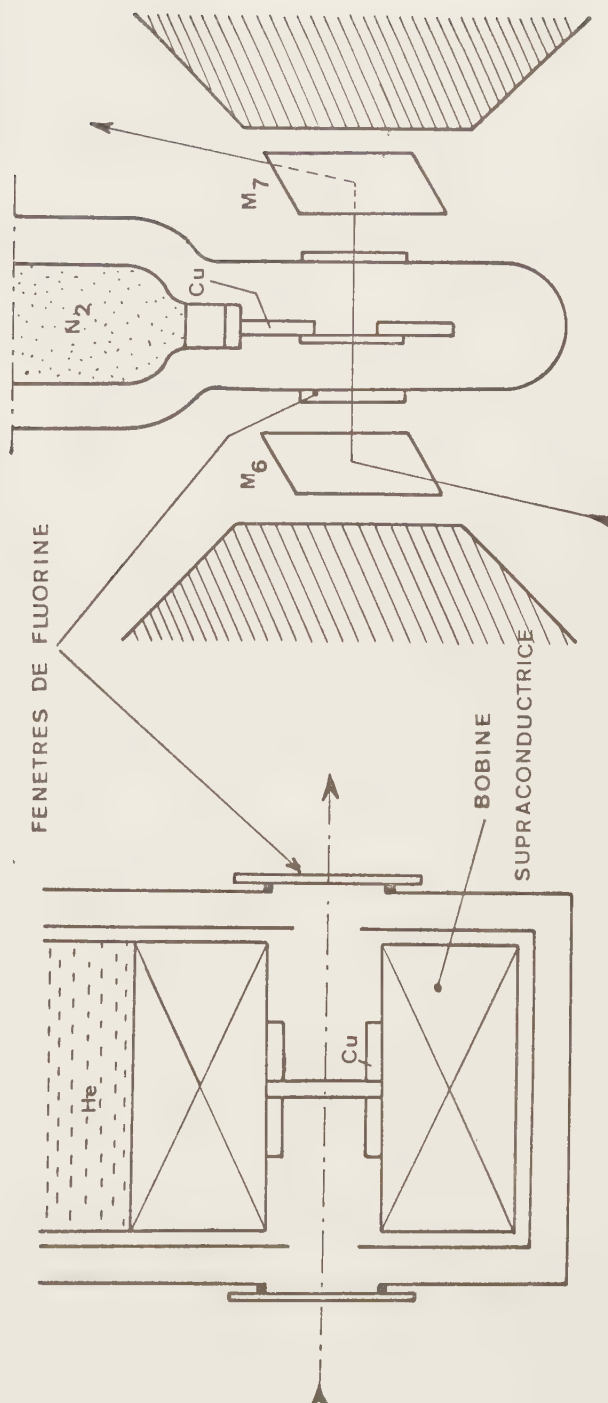
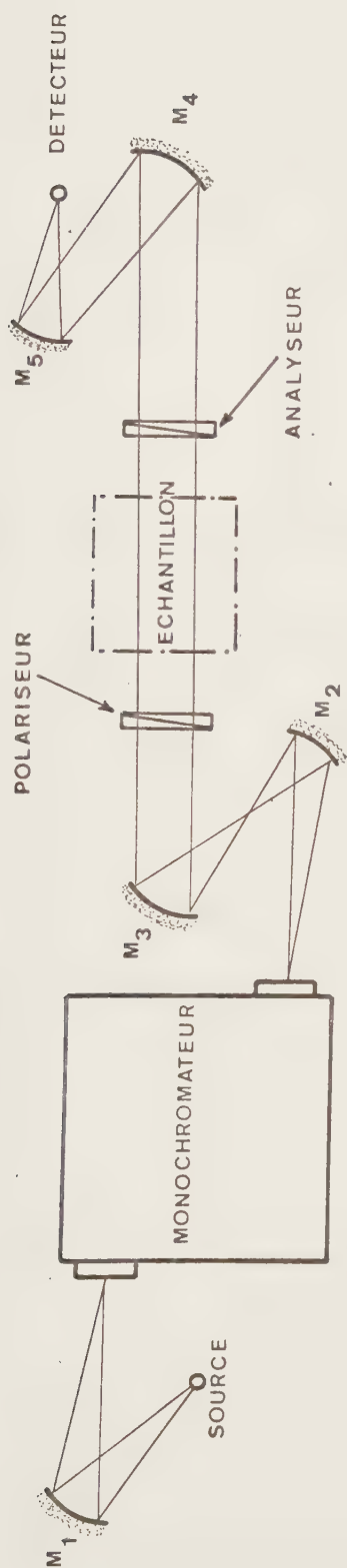
Pour l'étude de la deuxième bande, il faut disposer de deux échantillons de dopage différent. Le premier, de fort dopage ne pose aucun problème particulier. Le second, de dopage plus faible, doit être néanmoins tel que, à la température ambiante, la population soit suffisamment importante de façon que la rotation Faraday ne soit pas trop faible.

IX.2 - EFFET FARADAY

Le système optique utilisé est schématisé sur la figure IX.1. Un monochromateur Jobin-Yvon à quatre prismes de CaF_2 , donne de la lumière provenant, soit d'une lampe à filament de tungstène, soit d'un filament Nernst, une radiation monochromatique. La lumière est polarisée puis analysée à l'aide de polariseurs à lames de chlorure d'argent. La détection est faite par un détecteur pneumatique Onera.

Deux montages ont été utilisés, suivant que les mesures ont été faites à très basse température (20°K) ou à 90°K et 300°K . A 20°K , avec l'échantillon peu dopé, il a été nécessaire d'utiliser une bobine supraconductrice pour obtenir un champ de 5 Wb/m^2 (figure IX.1a). Le diamètre du tube intérieur à la bobine (2 cm pour une longueur de 30 cm) a nécessité une focalisation très longue. L'échantillon est monté sur un support en cuivre fixé à l'intérieur de la bobine par un joint d'indium. Pour l'étude à 90°K et 300°K , l'échantillon a été placé dans un cryostat en verre dont la queue, de 1 cm de diamètre extérieur, a pu être placée entre les pôles d'un électro-aimant de 4 cm d'entre fer et donnant une induction maximum de l'ordre de $1,4 \text{ Wb/m}^2$ (figure IX.1b).

Le polariseur est fixe. Les courbes donnant l'intensité du signal détecté, avec et sans champ dans le cas de la bobine supraconductrice, avec champ dans un sens puis dans l'autre avec l'électro-aimant, permettent en utilisant leurs symétries, d'obtenir l'angle de rotation à $\pm 0,5$ degré près.



a / MESURE A 20°K **b / MESURE A 90°K ET 300°K**

Fig: IX.1 DISPOSITIF DE MESURE D'EFFET FARADAY

IX.3 - REFLECTIVITE

Le coefficient de réflexion a été mesuré en utilisant un monochromateur à réseau Coderg. La séparation des ordres est faite avec des filtres appropriés. Les mesures ont été effectuées par comparaison avec la réflexion métallique sur un miroir en argent. Un détecteur Golay a été utilisé.

IX.4 - EFFET HALL ET RESISTIVITE

Les mesures ont été faites suivant deux techniques. D'une part suivant la méthode de Van der Pauw, d'autre part en utilisant des échantillons à oreilles. Dans la méthode de Van der Pauw, une permutation circulaire des quatre bornes a été opérée et la valeur moyenne des mesures a été prise comme résultat.

Chapitre X

ETUDE A 20°K DU MINIMUM EN $k = 0$ DE LA BANDE DE CONDUCTION

X.1 - ECHANTILLON DE TYPE p

J'ai vérifié tout d'abord que, aux erreurs d'expérience près, la rotation Faraday à 20°K était proportionnelle à l'induction magnétique, pour des longueurs d'ondes supérieures à celles correspondantes au gap. Ceci peut justifier que l'effet de la transition entre les premiers niveaux de Landau des bandes de valence et de conduction est prépondérant.

La rotation Faraday, donnée sur la figure X.1, compte tenu de l'absorption correspondante de la lumière montre que le gap est direct. Les valeurs positives de la rotation Faraday montrent la contribution d'une ou plusieurs bandes voisines.

La rotation Faraday des trous n'a pas été observée.

En utilisant la relation (VIII.1.17) et en supposant négligeables les effets des autres bandes au voisinage du gap direct, il est possible de déterminer la valeur de ω_g correspondant à ce gap :

$$E_g = 0,84 \text{ eV}$$

Valeur voisine du gap déterminé optiquement $E_g = 0,81 \text{ eV}$. La valeur supérieure ainsi déterminée s'explique par l'effet des autres bandes.

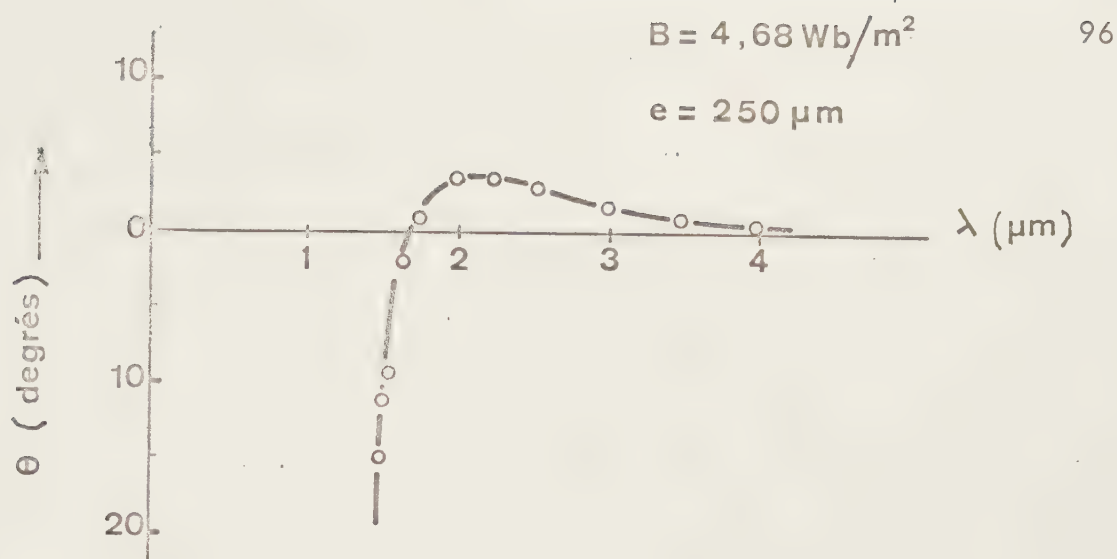


Fig: X-1 Rotation Faraday du type p à 20°K

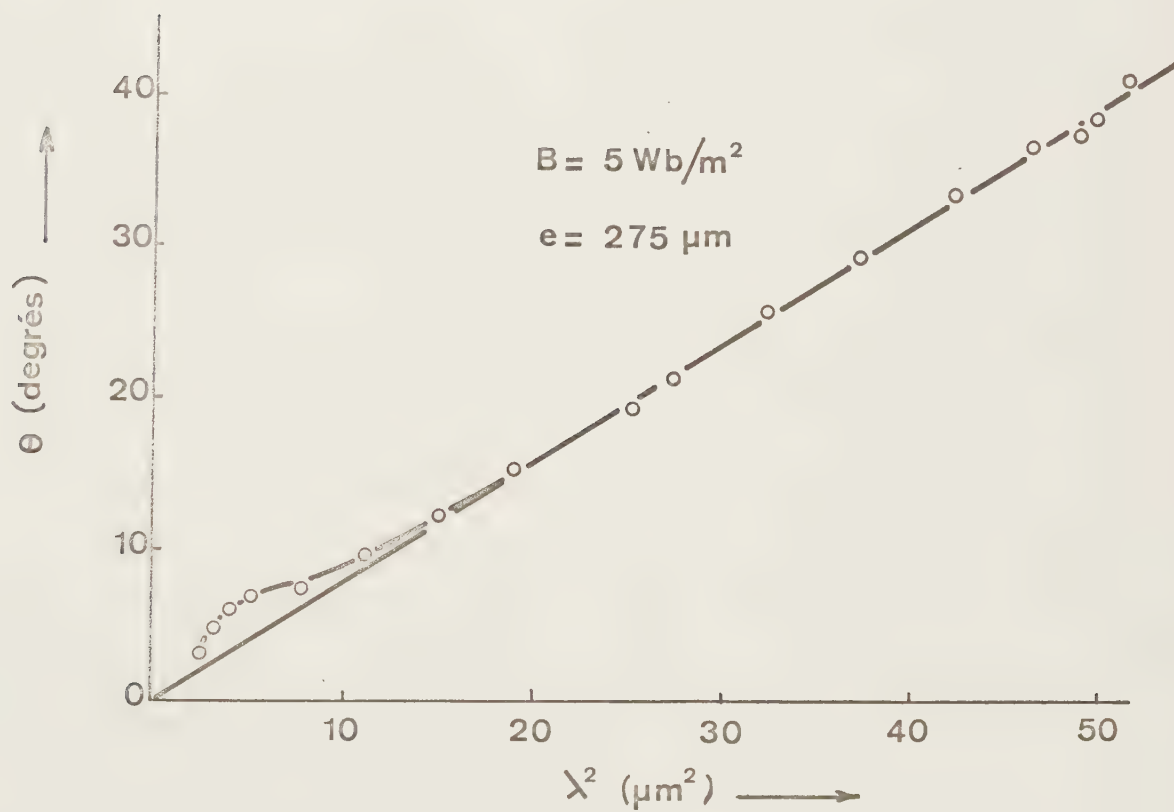


Fig: X-2 Rotation Faraday du type n à 20°K

X.2 - ECHANTILLON DE TYPE n

Jusqu'à présent, l'étude de l'effet Faraday a porté sur des échantillons de Ga Sb moyennement dopés à des températures de 300°K et 77°K. A ces températures la population des porteurs de la bande (111) n'est pas négligeable et les résultats obtenus ne peuvent être exploités directement. Il faut alors faire un certain nombre d'hypothèses non justifiées à priori (à savoir: invariance du nombre total de porteurs $n_1 + n_2$ et du rapport $\frac{\mu_1}{\mu_2}$ de leur mobilité en fonction de la température) pour pouvoir déterminer les caractéristiques de l'échantillon.

X.2.1 - Résultats.

Dans nos conditions expérimentales (dopage faible et température de 20°K) et compte tenu de résultats récents de mesure d'effet Hall et de magnétorésistance [18], nous pouvons considérer que, dans la rotation Faraday, l'effet Hall et la conductivité, la contribution des électrons (111) est négligeable ($\frac{n_2}{n_1} \ll 1$ et $\frac{\mu_1}{\mu_2} \simeq 6$). On peut donc tirer directement de ces expériences les quantités n_1 , μ_1 , et m_1^* .

Avec des inductions comprises entre 0 et 1,2 Wb/m² le coefficient de Hall R_H est constant et égal à $20 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{Cb}$.

La mesure de la résistivité de l'échantillon a donné $\rho = 0,55 \cdot 10^{-4} \Omega \cdot \text{m}$.

La rotation Faraday mesurée sur cet échantillon de 275 μm d'épaisseur est proportionnelle à l'induction magnétique dans le domaine de mesure variant de 0 à 5 Wb/m². Pour une induction de 5 Wb/m², la variation de θ en fonction de λ^2 , représentée sur la figure X.2 permet de déduire la relation

$$\frac{\theta}{\lambda^2} = 0,0135 \frac{\text{radian}}{\mu \text{ m}^2}$$

En prenant $n = 3,7$ (Cf. chapitre XI) et $r = 1$, l'ensemble de ces résultats expérimentaux conduit à :

$$n_1 = (3,1 \pm 0,1) \cdot 10^{17} / \text{cm}^3$$

$$\frac{m_1^*}{m_e} = (0,0475 \pm 0,002)$$

$$\mu_1 = 3660 \pm 240 \frac{\text{cm}^2}{\text{V.s}}$$

Il faut remarquer que, pour les longueurs d'ondes voisines du gap, les transitions interbandes perturbent l'effet des porteurs libres. La suppression de cet effet permet d'extrapoler la rotation Faraday due aux porteurs libres jusqu'à des longueurs d'ondes voisines de celle correspondant au gap.

X.2.2 - Justification à posteriori.

La position du niveau de Fermi par rapport au niveau E_1 du minimum (000) de la bande de conduction, peut être déterminée par

$$n_1 = 2 \times \frac{\pi^{3/2}}{h^3} (2 kT)^{3/2} m_1^* \mathcal{F}_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_F - E_1}{kT} \right) \quad (\text{X.2.1})$$

($\mathcal{F}_{\frac{1}{2}}$ étant la fonction de Fermi d'ordre $\frac{1}{2}$), en supposant la bande quadratique, soit

$$E_F - E_1 = 0,035 \text{ eV}.$$

Ce résultat, comparé à la différence $E_2 - E_1$ séparant les niveaux des minima (111) et (000) déterminée par H.B. Harland et J.C. Wooley et A. Sagar, de l'ordre de 80 meV, montre que l'effet des porteurs de type (111) est négligeable.

A la température de 20°K, la diffusion des porteurs par les impuretés ionisées est prépondérante; dans ce cas r est donné par la relation:

$$r = 0,75 \frac{\Gamma(3/2) \mathcal{F}_{3/2}(\eta) \Gamma(9/2) \mathcal{F}_{7/2}(\eta)}{\Gamma(3) \mathcal{F}_2(\eta)}$$

avec

$$\eta = \frac{E_F - E_1}{kT}, \quad E_F - E_1 = 0,035 \text{ eV} \quad \text{et} \quad T = 20^\circ\text{K}, \text{ il vient}$$

$$r \simeq 1,006.$$

Remarque . L'échantillon a été taillé en forme de prisme à angle au sommet très faible pour minimiser l'effet des multiples réflexions [40]. Dans l'hypothèse la plus défavorable, c'est-à-dire si cette précaution est inopérante, la relation doit être corrigée et son exploitation conduit à $\frac{m_1^*}{m_e} = 0,050$; ce résultat est compris dans les limites d'erreur expérimentale.

Chapitre XI

ETUDE DU MINIMUM (1,1,1) DE LA BANDE DE CONDUCTION

XI.1 - GENERALITES

Dans le cas d'un échantillon très dopé, c'est-à-dire lorsque les porteurs du deuxième minimum ne sont plus négligeables, examinons les expressions de la réflectivité, de la rotation Faraday et de l'effet Hall.

. Pour des longueurs d'ondes comprises entre 5 et 15 μm , le coefficient d'absorption est négligeable devant n , $\omega\tau \gg 1$ et la relation (VIII.2.10) devient:

$$n^2 = \epsilon = \epsilon_{\infty} - \frac{e^2 \lambda^2}{4\pi^2 \epsilon_0 c^2} \left[\frac{n_1}{m_{*1}} + \frac{n_2}{m_{*2r}} \right] \quad (\text{XI.1.1})$$

Soit en posant

$$P = \frac{n_1}{m_{*1}} + \frac{n_2}{m_{*2r}} \quad (\text{XI.1.2})$$

$$P = \frac{\epsilon_{\infty} - \epsilon}{\lambda^2} \frac{4\pi^2 \epsilon_0 c^2}{e^2}$$

L'étude de la réflectivité dans cette zone de longueur d'onde permet avec

$$R = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \text{ de déterminer } \epsilon \text{ donc } P.$$

La rotation Faraday donne en posant dans la relation (VIII.1.16)

$$F = \frac{n_1}{m_1^*} + \frac{n_2}{m_{2f}^*} \quad (XI.1.3)$$

$$F = \theta \frac{4\pi^2 c^3 n \epsilon_0}{e^3 \lambda^2 B}$$

Dans la relation (VIII.2.13) donnant la constante de Hall R_H , on peut prendre $r_1 = 1$ (cf. chapitre X) et on peut négliger le terme complémentaire à 1 au numérateur : en effet $\frac{n_2}{r_1} F$ est voisin de 1 et $\frac{n_2}{n_1} \left(\frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^2$ est très inférieur à 1; on obtient alors:

$$R_H = \frac{1}{n_1 e} \frac{1}{\left(1 + \frac{n_2}{n_1} \frac{\mu_2}{\mu_1}\right)^2} \quad (XI.1.4)$$

L'étude de ces trois effets sur un même échantillon fournit trois relations pour les cinq inconnues suivantes: la masse transversale m_t du minimum (111), le rapport K de la masse longitudinale et de la masse transversale, le rapport $\frac{\mu_2}{\mu_1}$ des mobilités des électrons dans les bandes (1,1,1) et (000), les densités n_1 et n_2 des électrons dans ces deux bandes.

L'adjonction de la conductivité donnerait une relation supplémentaire mais introduirait une inconnue supplémentaire, μ_0 .

XI.2 - ETUDE DE DEUX ECHANTILLONS DE DOPAGE DIFFERENT

L'étude simultanée à une même température de deux échantillons de dopage différent permet de déterminer pour chaque échantillon des grandeurs particulières à chacun d'eux, à savoir n_1 , n_2 et $\frac{\mu_1}{\mu_2}$ ainsi que des grandeurs

communes à chacun d'eux, à savoir la distance entre les deux minima et la masse effective en fonction d'un seul paramètre commun, le rapport K .

En effet, il est possible pour chaque valeur du rapport K et pour chaque échantillon de résoudre le système des équations (XI.1.2), (XI.1.3) et (XI.1.4) pour chaque valeur du rapport $\frac{\mu_1}{\mu_2}$.

L'équation obtenue pour n_1 en fonction de $\frac{\mu_1}{\mu_2}$, R_H , F et P est une équation du quatrième degré. Sa résolution ne peut se faire aisément. Il est plus aisé de procéder, à l'aide d'une méthode auto-vérifiée, de la manière suivante:

La contribution à l'effet Faraday des porteurs du premier minimum en $k = 0$ est prépondérante. On peut donc, comme point de départ, supposer que seul ce type de porteurs contribue à cet effet et déterminer n_1 . Il est alors possible de calculer n_2 à l'aide de

$$n_2 = n_1 \frac{\mu_1}{\mu_2} \left(\frac{1}{\sqrt{R_H n_1 e}} - 1 \right) \quad (\text{XI.2.1})$$

On calcule alors m_{2r}^* à l'aide (XI.1.2). On détermine ensuite m_{2f}^* , et on introduit ces valeurs n_2 et m_{2f}^* dans (XI.1.3) et ainsi de suite.

La méthode est rapidement convergente et nécessite une dizaine de cycles pour obtenir n_1 , n_2 , m_{2r}^* , m_{2f}^* avec 5 chiffres significatifs en fonction de K et de $\frac{\mu_1}{\mu_2}$. Il faut remarquer que pour des valeurs de $\frac{\mu_1}{\mu_2}$ trop petites, la méthode converge difficilement. Il faudrait alors remettre en cause la formule (XI.1.4).

Avec l'aide des relations:

$$\begin{aligned} n_1 &= 2 \frac{\pi}{h^3} (2kT)^{3/2} m_1^*{}^{3/2} \mathcal{F}_{1/2} \left(\frac{E_F - E_1}{kT} \right) \\ n_2 &= 2 \frac{\pi}{h^3} (2kT)^{3/2} \frac{1}{4K} m_{2t}^*{}^{3/2} \left(\frac{E_F - E_2}{kT} \right) \end{aligned} \quad (\text{XI.2.2})$$

où E_1 et E_2 sont les énergies des minima des bandes (000) et (111), il est donc possible de construire pour chaque échantillon la courbe $\Delta E = E_2 - E_1$ en fonction de m_{2r}^* pour chaque valeur de K . L'intersection des deux courbes associées aux deux échantillons donne donc la valeur commune de $E_2 - E_1$ et de m_{2r}^* pour chaque valeur de K (voir figure XI.1)

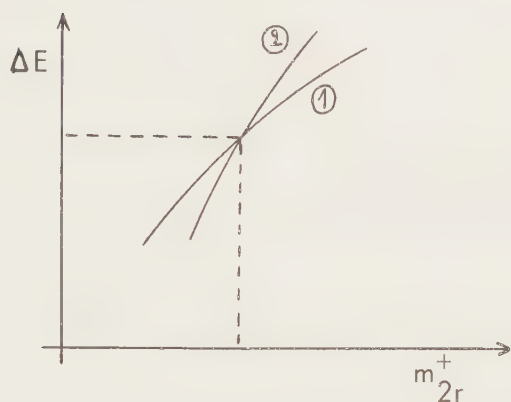


Fig.XI.1

Il est alors facile de déterminer les quantités n_1 , n_2 , $\frac{\mu_1}{\mu_2}$ pour les deux échantillons en fonction de K .

La mesure de la conductivité permet alors de déterminer les mobilités des deux types de porteurs en fonction de K .

XI.3 - COEFFICIENT DE TEMPERATURE de $E_2 - E_1$

En supposant les masses des deux types de porteurs indépendantes de la température et connues, il est possible, en étudiant à une autre température l'effet Faraday et la réflectivité, de déterminer l'écart entre les deux minima à cette température. Nous avons ainsi le coefficient de température de $E_2 - E_1$ en fonction du rapport K .

Remarque 1. Il aurait été possible d'appliquer, à cette température, la méthode exposée au paragraphe XI.1. Les résultats auraient pu permettre de déterminer le rapport K . Cependant la précision de la mesure de P à cette température (90°K) ne nous a pas permis d'utiliser cette méthode. Toutefois la précision de la mesure permet de déterminer $E_2 - E_1$, à cette température, à 2 ou 3 meV près.

Remarque 2 . La mesure du coefficient de Hall et de la conductivité permet de déterminer la mobilité des deux types de porteurs.

XI.4 - RESULTATS EXPERIMENTAUX

XI.4.1 - Effet Faraday

Sur la figure XI.2 sont portées les rotations Faraday des deux échantillons N 3 et N 5 , d'épaisseur respective 0,285 mm et 0,310 mm, en fonction du carré de la longueur d'onde λ aux températures de 90°K et 300°K .

Pour déterminer la contribution des porteurs libres, il faut déterminer l'asymptote des courbes puisque les contributions des transitions interbandes tendent vers 0 lorsque λ^2 devient important.

La valeur de n utilisée pour le calcul de F (cf. relation (XI.1.3)) est déterminée à l'aide de la réflectivité.

Les valeurs de F pour les deux échantillons aux deux températures sont données dans le tableau XI.1 .

XI.4.2 - Réflectivité

Sur les figures XI.3, XI.4, XI.5 et XI.6 sont donnés d'une part les coefficients de réflexion de chaque échantillon en fonction de la longueur d'onde λ et la valeur de ϵ en fonction de λ^2 dans la zone où le coefficient k est tel que k^2 est négligeable devant n^2 .

Les valeurs de P (cf. relation (XI.1.2)) déduites sont indiquées dans le tableau XI.1.

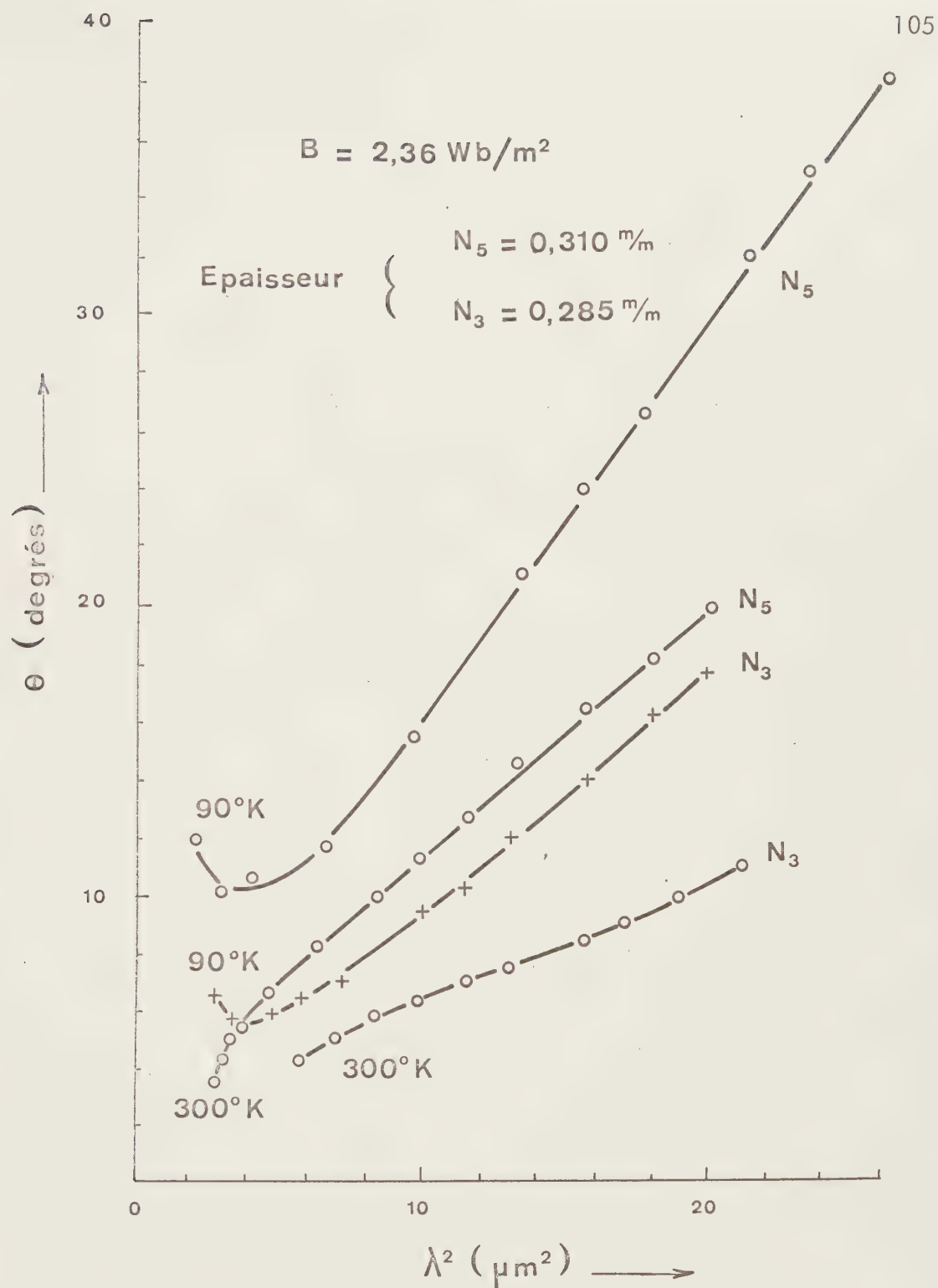


Fig: XI.2 Rotation Faraday

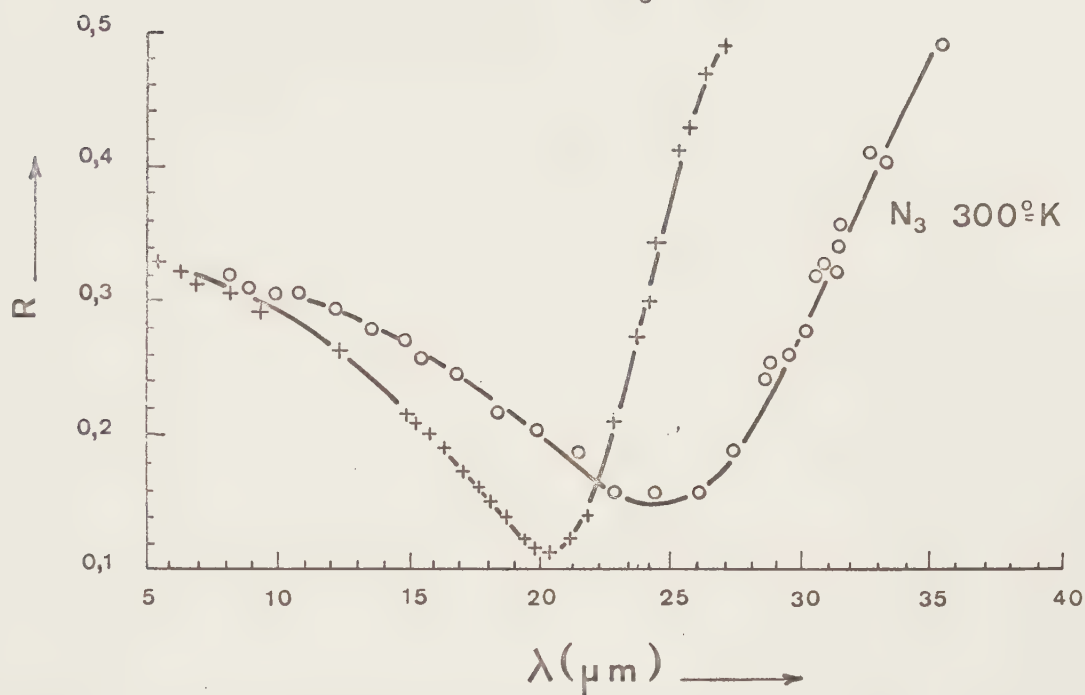


Fig: XI.3 Coefficient de réflexion

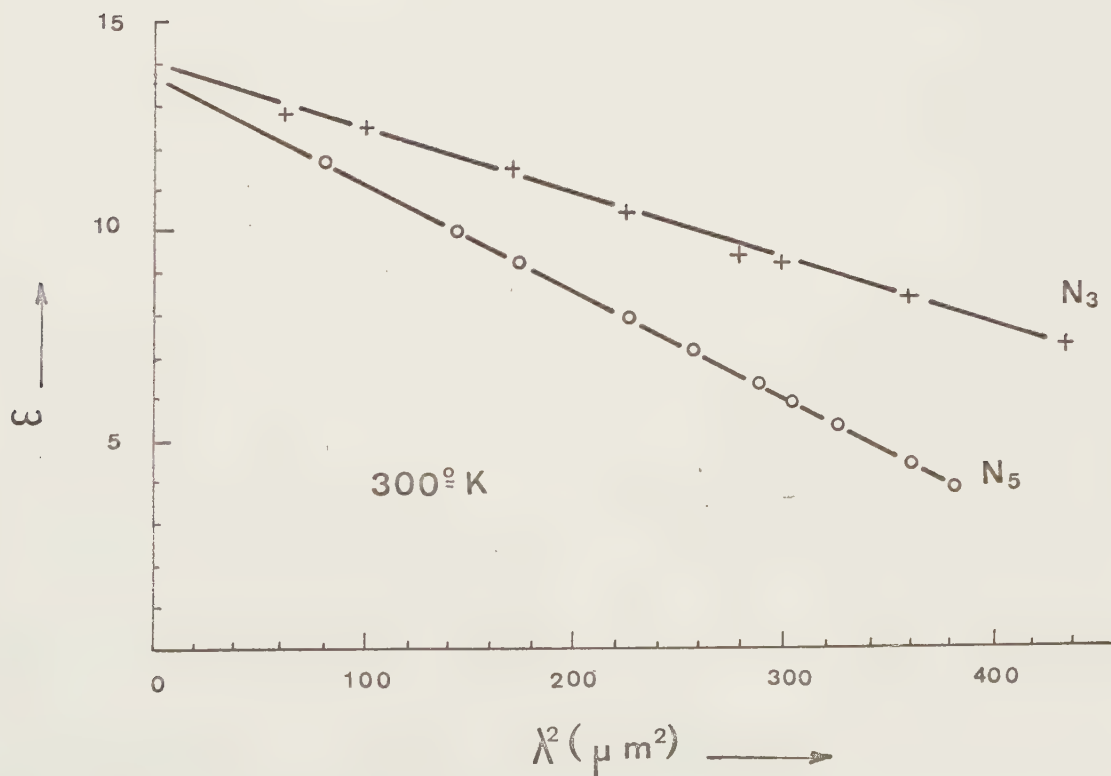


Fig : XI.4

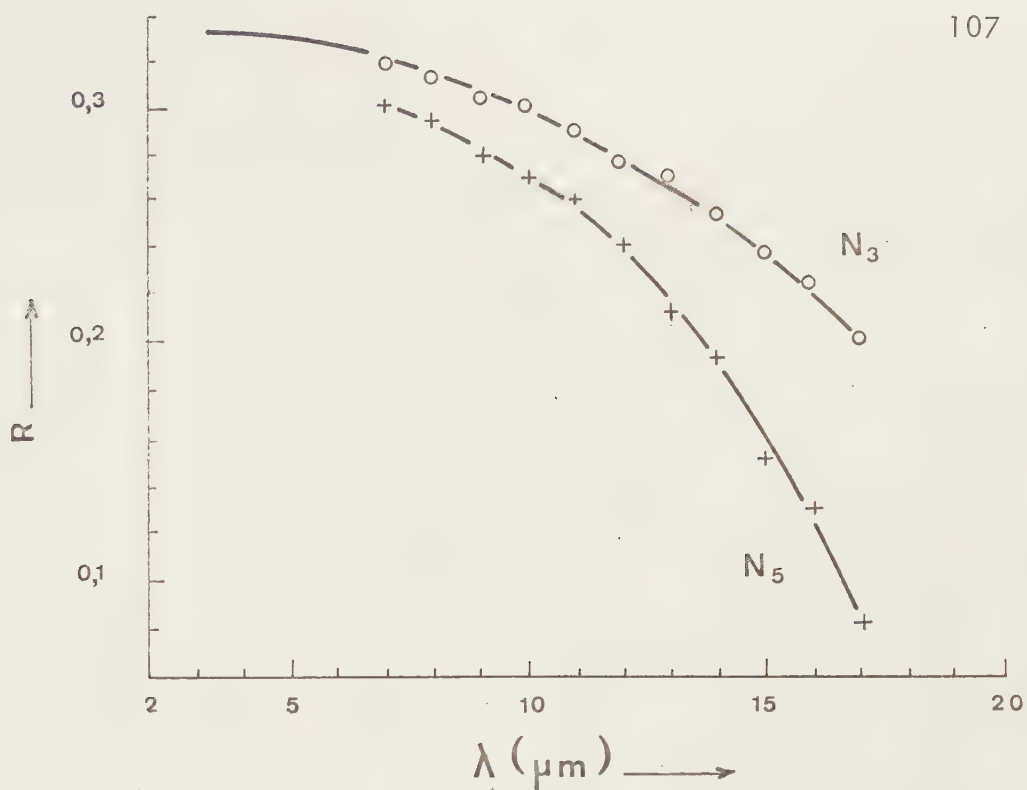
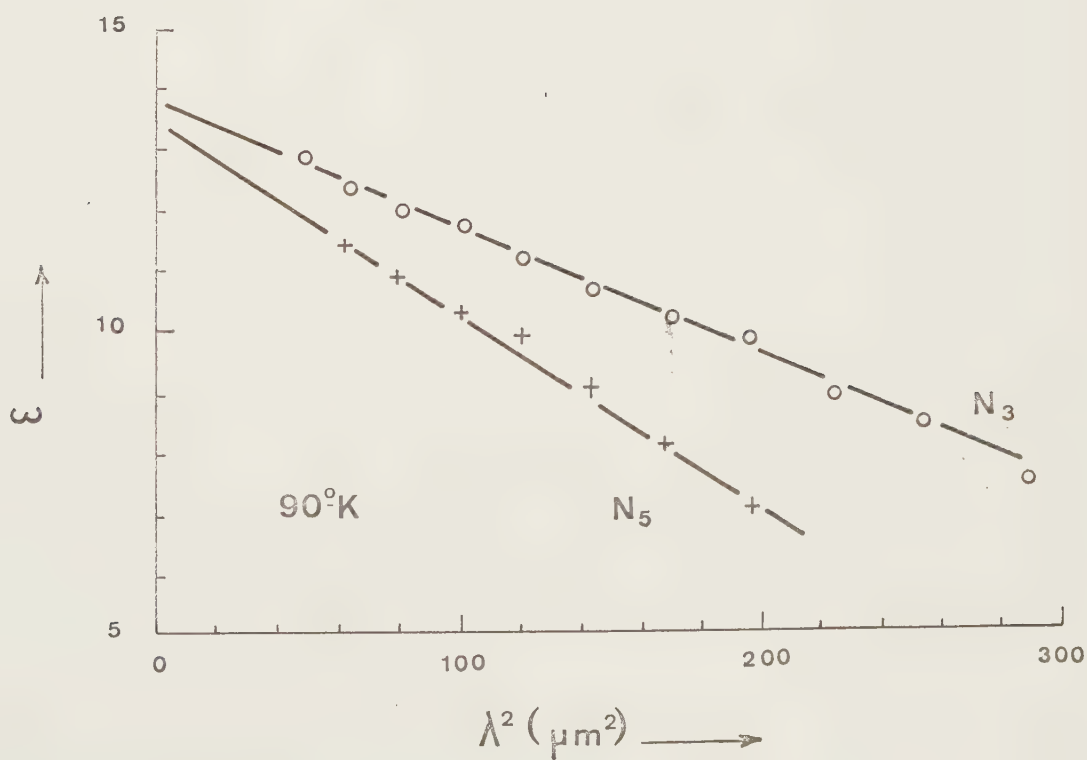
Fig. XI.5 Coefficient de réflexion (90°K)

Fig. XI.6

XI.4.3 - Effet Hall et conductivité

La constante de Hall R_H mesurée est indépendante de l'induction magnétique pour les deux échantillons et aux deux températures et ceci pour une induction magnétique variant de 0 à $1,2 \text{ Wb/m}^2$.

La constante de Hall et la conductivité des deux échantillons sont indiquées dans le tableau XI.1.

	T = 300° K	T = 90° K
N 5	$F = 3,92 \cdot 10^{86}$ $P = 3,15 \cdot 10^{55}$ $R_H = -4,00 \cdot 10^{-6}$ $\sigma = 6,284 \cdot 10^4$	$F = 5,75 \cdot 10^{86}$ $P = 3,80 \cdot 10^{55}$ $R_H = -3,86 \cdot 10^{-6}$ $\sigma = 17,6 \cdot 10^4$
N 3	$F = 2,49 \cdot 10^{86}$ $P = 1,86 \cdot 10^{55}$ $R_H = -7,25 \cdot 10^{-6}$ $\sigma = 4,22 \cdot 10^4$	$F = 4,05 \cdot 10^{86}$ $P = 2,24 \cdot 10^{55}$ $R_H = -5,75 \cdot 10^{-6}$ $\sigma = 13,45 \cdot 10^4$

Tableau XI.1 (unités M.K.S.A.)

XI.5 - RESULTATS

Les résultats sont indiqués sur les figures XI.7, XI.8, XI.9 et XI.10. Pour chaque échantillon et aux deux températures, sont précisées les variations, en fonction de K , des deux types de porteurs, des rapports de mobilité, la masse électrique et la masse transversale des porteurs du deuxième minimum, la distance entre les deux minima ainsi que son coefficient de température.

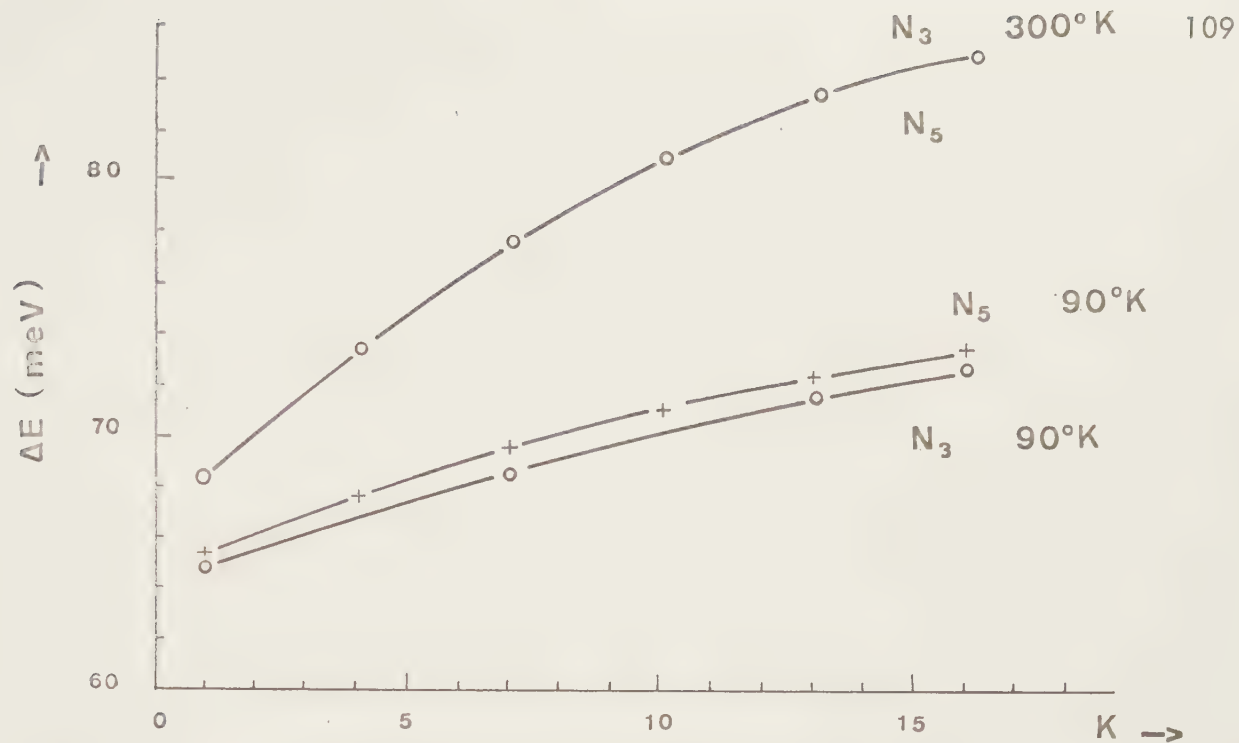


Fig: XI.7 Variation de $\Delta E = E_2 - E_1$ en fonction de K

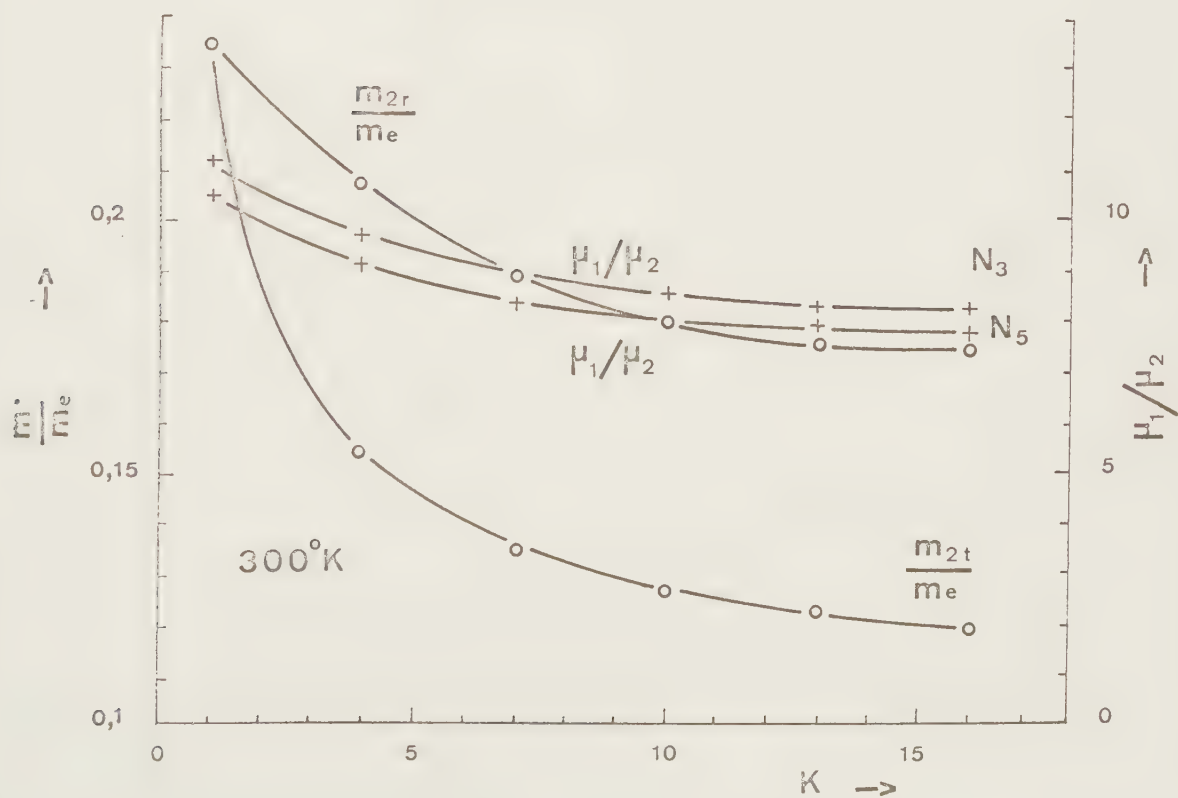


Fig: XI.8 Variation de $\frac{\mu_1}{\mu_2}$, $\frac{m_{2r}}{m_e}$, $\frac{m_{2t}}{m_e}$ en fonction de K

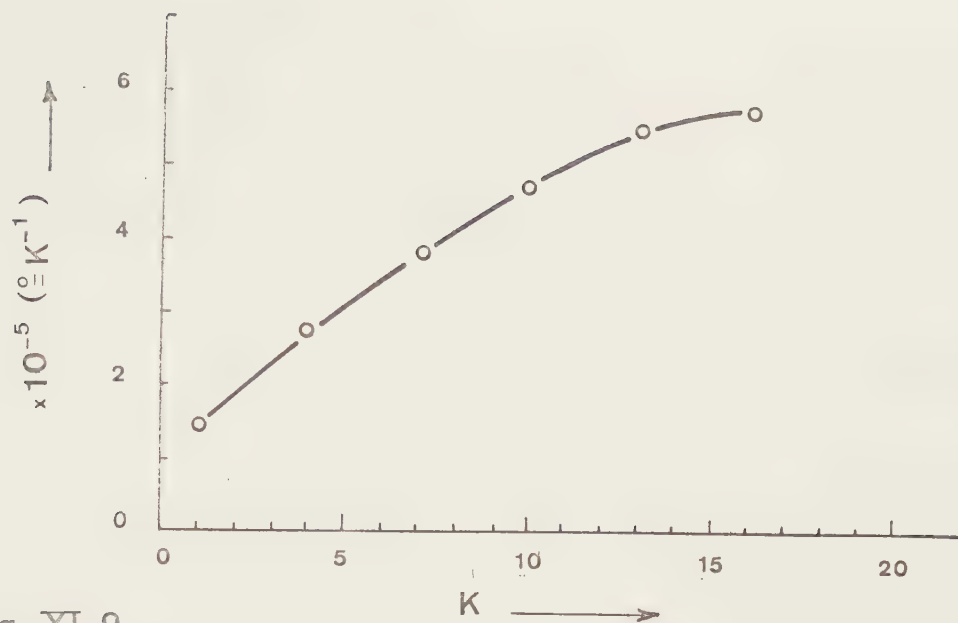


Fig: XI.9

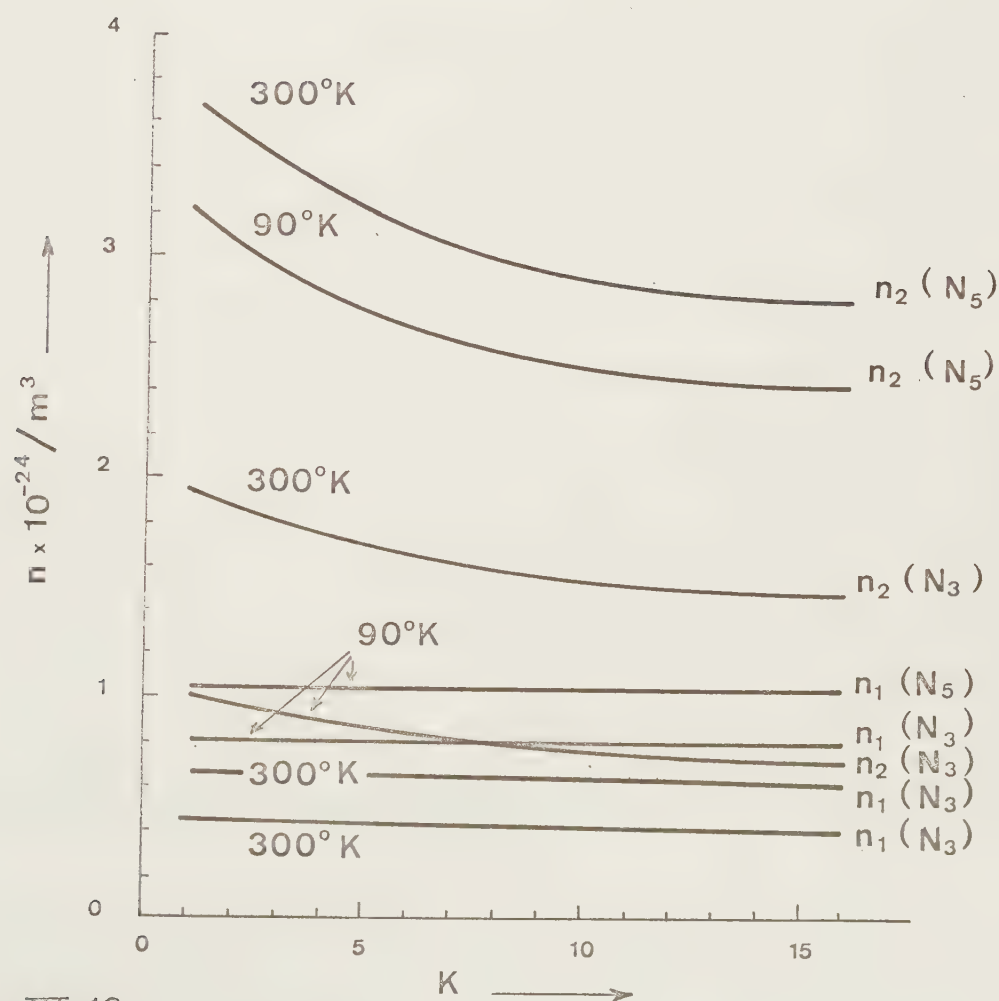
Coefficient de température de ΔE 

Fig: XI.10

On constate que

- 1°/ le nombre de porteurs du premier minimum est pratiquement indépendant de K ,
- 2°/ le produit $\frac{n_2}{n_1} \frac{\mu_2}{\mu_1}$ est pratiquement indépendant de K . Ceci est intéressant car les mobilités des deux types de porteurs seront très peu affectées par la valeur de K ,
- 3°/ le nombre total de porteurs de l'échantillon N5 (le plus dopé) est indépendant de la température tandis que pour N3 ce nombre total de porteurs augmente de près de 20% entre 90°K et 300°K.

En prenant pour K la valeur déterminée théoriquement dans la première partie: $K = 13$, on trouve les résultats suivants:

- . La masse effective transversale $m_{2t}^* = 0,122 m_e$. Cette valeur est en bon accord avec celle calculée théoriquement dans la première partie ($0,124 m_e$).
- . La valeur de $\Delta E = E_2 - E_1$ est de 83,5 meV à 300°K et de 72 meV à 90°K, ce qui donne un coefficient de température de $5,5 \cdot 10^{-5} \text{ eV/}^\circ\text{K}$.
- . Les valeurs des populations n_1 et n_2 ainsi que celles des mobilités et la position du niveau de Fermi sont données dans le tableau suivant:

	T(°K)	$n_1 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$	$n_2 \cdot 10^{24} \text{ m}^{-3}$	$\frac{\mu_1}{\mu_2}$	$\mu_1 (\text{cm}^2/\text{V.S})$	$\mu_2 (\text{cm}^2/\text{V.S})$	$E_F - E_1 (\text{eV})$
N 5	300	0,61	2,82	7,8	4050	520	0,040
	90	1,03	2,45	9,45	8650	915	0,074
N 3	300	0,42	1,50	8,3	4400	530	0,024
	90	0,80	0,71	5,4	8800	1650	0,060

Remarque. L'étude de la réflectivité au voisinage de la résonance plasma vers les grandes longueurs d'ondes permet de vérifier les relations (VIII.2.10). En effet connaissant le nombre de porteurs dans les deux minima, les masses effectives et les mobilités, il est possible de déterminer $n^2 - k^2$ et $2nk$.

Dans le plan (n, k) , $n^2 - k^2$ et nk sont représentées par deux hyperboles.

La relation $R = \frac{(n - ik - 1)^2}{(n - ik + 1)^2}$ représente dans le plan (n, k) une famille de cercles de rayon $2R^{1/2}/(1-R)$ centrés à $n = \frac{1+R}{1-R}$.

Ainsi pour des valeurs de R et λ données, le cercle et les deux hyperboles doivent avoir un point commun. Ce point commun a pour coordonnées n et k : l'indice et le coefficient d'absorption de l'échantillon à la longueur d'onde considérée.

A la température ambiante et pour les deux échantillons N3 et N5, la longueur d'onde correspondant à $R = 0,4$ est $32,6 \mu$ pour N3 et $24,6 \mu$ pour N5.

Les valeurs de nk et de $n^2 - k^2$ sont pratiquement indépendantes de K .

$$N 5 \quad \begin{cases} n^2 - k^2 = -1,24 \\ nk = 1,44 \end{cases}$$

$$N 3 \quad \begin{cases} n^2 - k^2 = -1,20 \\ nk = 1,72 \end{cases}$$

Sur la figure XI.11, on peut constater que pour les deux échantillons, les deux hyperboles et le cercle correspondant à $R = 0,40$ ont des intersections voisines dans le plan (n, k) mais n'ont pas de point commun.

En fait, nous avons supposé, pour établir les relations (VIII.2.10) que la partie réelle de ϵ du réseau ne dépendait pas de la longueur d'onde et était égale à ϵ_∞ et que le coefficient d'absorption du réseau était nul. Cette hypothèse est certainement valable pour les longueurs d'ondes comprises entre 3 et

15 μ . Pour des longueurs d'ondes supérieures à 20 μ , la polarisabilité du réseau peut déjà présenter une variation en fonction de la fréquence. Il faudrait alors remplacer ϵ_{∞} dans la relation (VIII.2.10) par $\epsilon(\omega)$. Une diminution de ϵ_{∞} de 2% à 24,6 μ suffit à faire couper les trois courbes en un même point pour l'échantillon N5. Pour N3 à 34,6 μ , une variation de 4% donnerait le même résultat. D'autre part, cette variation de ϵ_{∞} correspond à l'erreur que l'on fait dans sa détermination en faisant tendre λ vers 0.

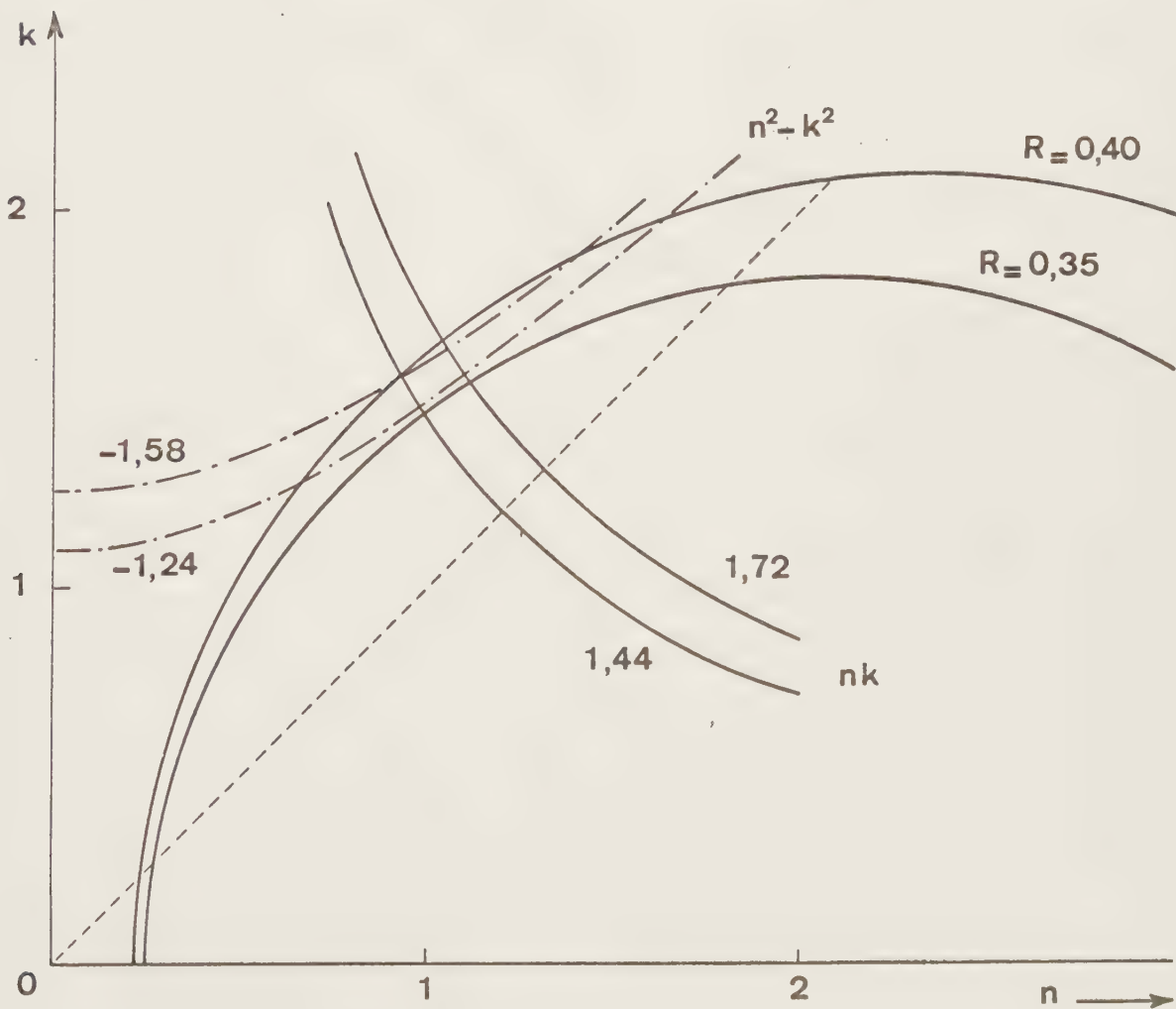


Fig: XI. 11

C O N C L U S I O N

Dans la première partie de ce travail, la structure de bande de l'antimoniure de gallium a été obtenue à l'aide de la méthode de Kohn-Rostoker utilisée de manière semi-empirique. Deux paramètres ajustables ont été introduits.

Le paramètre $\overline{\Delta V}_1$ a été choisi de façon telle que les niveaux Γ_{15C} et Γ_{15V} au centre de la zone de Brillouin soient distants de 3,40 eV. Cette dernière valeur permet d'interpréter les pics d'électrorélectivité correspondant aux transitions possibles entre les niveaux formant la structure fine de Γ_{15C} et Γ_{15V} , et ceci sans trop perturber le potentiel initial.

Le paramètre $\overline{\Delta V}_0$ a été choisi de telle sorte que la distance entre Γ_{1C} et Γ_{15V} soit égale à la largeur de la bande interdite sans tenir compte de l'interaction spin-orbite, soit $\Gamma_{1C} - \Gamma_{15V} = 0,95$ eV.

Les résultats obtenus pour la totalité de la zone de Brillouin permettent de donner une interprétation satisfaisante de l'ensemble du spectre d'électrorélectivité. Bien qu'une partie des résultats expérimentaux puisse être interprétée en détail et que cette interprétation serve de base de départ dans la construction d'un modèle de bande empirique, la position exacte d'un petit nombre de niveaux est connue en fait avec une précision inférieure à 0,1 eV. La confrontation complète des résultats obtenus avec les valeurs expérimentales permet de conclure à la validité du modèle proposé.

Les positions des deux minima relatifs de la bande de conduction ont été déterminées par rapport au minimum absolu Γ_{1C} en $k = 0$. Le premier, L_{1C} ,

situé sur la surface de la zone de Brillouin est à 0,063 eV audessus de Γ_{1C} (valeur expérimentale = 0,082 eV). Le second, situé suivant la direction (1,0,0) à 87% environ de la valeur de k correspondant au point X de la zone de Brillouin, est à 0,30 eV au dessus de Γ_{1C} (valeur expérimentale = 0,30 eV).

L'étude comparative des résultats, avec les données expérimentales d'une part, avec les résultats obtenus à l'aide de la méthode O. P. W. d'autre part, montre que la méthode de Kohn-Rostoker, malgré les restrictions qu'elle nécessite sur le modèle de potentiel utilisé pour être applicable, peut donner de bons résultats dans l'étude des composés possédant une liaison électronique à caractère covalent important.

La détermination théorique des masses effectives des différents porteurs de la bande de conduction et de la bande de valence a été faite en utilisant, soit directement la courbure de $E(\vec{k})$ au voisinage du minimum correspondant, soit la méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$.

Les électrons du premier minimum de la bande de conduction ont ainsi une masse effective isotrope $m^*(\Gamma_{1C}) = 0,040 m_e$; cette valeur est à comparer avec la valeur expérimentale $0,048 m_e$ déterminée par l'étude de l'effet Faraday à 20°K. L'écart entre des deux valeurs peut s'expliquer en partie par la non-parabolicité de la bande.

La masse effective des électrons du deuxième minimum est fortement anisotrope, ainsi

$$K = \frac{m_l^*(L_{1C})}{m_t^*(L_{1C})} = 13 \text{ avec } m_l^*(L_{1C}) = 1,6 m_e \text{ et } m_t^*(L_{1C}) = 0,124 m_e.$$

L'étude expérimentale basée sur l'effet Faraday, la réflectivité infrarouge

et l'effet Hall a permis de déterminer ces masses effectives ainsi que la distance de L_{1C} par rapport à Γ_{1C} en fonction du rapport K qu'il a été impossible d'éliminer des équations. En prenant la valeur théorique $K = 13$, la masse trans-
-versale est $m_t^*(L_{1C}) = 0,122 m_e$, l'écart entre les deux minima $E = 0,0835 \text{ eV}$ et son coefficient de température $5, 5 \cdot 10^{-5} \text{ eV/}^\circ\text{K}$.

La mesure complémentaire de résistivité a permis de déterminer la mobilité des deux types de porteurs; ces mobilités dépendent de façon importante du dopage de l'échantillon.

ANNEXE I

```

C
C PROGRAMME COMPLET COEFFICIENTS COMPLEXES
  DIMENSION A(28,7),SV(20),SF(20)
  DIMENSION U(5),H(5),D(3)
  DIMENSION Q(3,3),R(3,3),T(3),XR(3)
  DIMENSION LN(15),MN(15),ENER(20)
C COEFFICIENTS DE LA METHODE DE GAUSS
  U(1)=0.90617984
  U(2)=-0.90617984
  U(3)=0.53846931
  U(4)=-0.53846931
  U(5)=0.
  H(1)=0.23692688
  H(2)=0.23692688
  H(3)=0.47862867
  H(4)=0.47862867
  H(5)=512./900.
C CALCUL DES HARMONIQUES SPHERIQUES
  A(1,1)=1.
  DO 8 J=2,7
8  A(1,J)=0.
  I=2
  P=1.
10 J=7
  L=P
20 IF(L-J+1)11,12,12
11 A(I,J)=0.
  J=J-1
  GO TO 20
12 PV=P
  PVD=2.*P-1.
  PVB=2.
  A(I,J)=1.
  SIG=-1.
30 J=J-1
  IF(J-1)40,13,13
13 A(I,J)=0.
  J=J-1
  IF(J-1)40,14,14
14 A(I,J)=SIG*A(I,J+2)*PV*(PV-1.)/PVB/PVD
  PV=PV-2.
  PVB=PVB+2.
  PVD=PVD-2.
  GO TO 30
40 COE=1.
  FJ=1.
  FD=1.
  DO 42 JJ=1,L

```



```

      COE=COE*FJ/FD
      FJ=FJ+2.
42  FD=FD+1.
      DO 41 J=1,7
41  A(I,J)=A(I,J)*COE
      K=0
45  I=I+1
      K=K+1
      IF(K-L)46,46,47
47  P=P+1.
      IF(P-6.)10,10,60
46  A(I,7)=0.
      DO 48 J=1,6
      FJ=J
48  A(I,J)=A(I-1,J+1)*FJ
      GO TO 45
60  I=0
      DO 70 L=1,7
      P=L-1
      SIG=(2.*P+1.)/2./3.1415927
      DO 70 M=1,L
      PV=M-1
      PVD=P-PV+1.
      IF(PV)73,72,73
72  COE=SIG/2.
      GO TO 74
73  COE=SIG
71  COE=COE/PVD
      PVD=PVD+1.
      IF(PVD-P-PV)71,71,74
74  COE=SQRT(COE)
      I=I+1
      DO 70 J=1,7
70  A(I,J)=A(I,J)*COE
C  ENTREES DES CARACTERISTIQUES DU CRISTAL,DES ENERGIES,DU VECTEUR K
      READ(1,9)AA
      READ(1,2)((R(I,J),J=1,3),I=1,3)
      READ(1,2)((Q(I,J),J=1,3),I=1,3)
      READ(1,2)(D(I),I=1,3)
450 READ(1,7)ETA,TO,PAS
      READ(1,1)NMM
      READ(1,5)(LN(I),MN(I),I=1,NMM)
25  READ(1,1)NM
      READ(1,6)(ENER(I),I=1,NM)
      READ(1,2)(XR(I),I=1,3)
      DO 455 IN=1,NM
      DO 455 IM=1,NMM
      E=ENER(IN)
      L=LN(IM)
      M=MN(IM)
      IND=0
      P1=0.

```



```

      P2=0.
      P3=0.
      COEM=0.
      PMAX=0.
706  SR=0.
      SI=0.
      S=0.
      SP=0.
      DO 805 I=1, 20
      SV(I)=0.
805  SF(I)=0.
      IF(IND)601, 83, 601
601  LIM=2.*PMAX+1.
      P1=-PMAX
      DO 617 N=1, LIM
      P2=-PMAX
      DO 616 J=1, LIM
      P3=-PMAX
      DO 615 K=1, LIM
83   DO 84 I=1, 3
84   T(I)=R(1, I)*P1+R(2, I)*P2+R(3, I)*P3+XR(I)
      COE=T(1)*T(1)+T(2)*T(2)+T(3)*T(3)
      IF(COE-0.001)92, 92, 49
92   IF(L)950, 951, 950
950  IF(IND)615, 715, 615
951  SP=E/ETA
      SP=-EXP(SP)/E
952  CT=0.
      IF(IND)37, 708, 37
49   CT=(E-COE)
      COE=SQRT(COE)
      IF(IND)88, 89, 88
88   IF(COE-COEM)89, 89, 615
89   AL=L
      SP=AL*ALOG(COE)+(CT/ETA)
      IF(SP+85.)712, 712, 501
712  IF(IND)615, 710, 615
501  SP=-EXP(SP)/CT
      IF(IND)707, 708, 707
708  IF(S+SP-S)709, 710, 709
709  S=SP+S
715  P1=P1+1.
      GO TO 83
710  IND=1
      COEM=COE
      PMAX=P1+2.
      GO TO 706
C     CARACTERISTIQUES DE DIRECTION ESPACE RECIPROQUE
C     DIRECTION SIGMA
707  CT=(T(1)+T(2))/SQRT(2.)*COE)
      IF(M)993, 999, 993
993  ST=SQRT(ABS(1.-CT*CT))

```



```

      SP=SP*ST**M
999 IF(ABS(T(3))-0.0001)35,34,34
35 IF(ABS(T(1)-T(2))-0.0001)37,36,36
36 CF=3.1415927/2.
   CO TO 86
37 CF=0.
   CO TO 86
34 CF=(T(1)-T(2))/(T(3)*SQR T(2.)),
   CF=ATAN(CF)
   IF(T(3))85,86,86
85 CF=CF+3.1415927
86 PV=M
   CF=COS(CF*PV)
   I=L*(L+1)/2+1+M
   PV=CT*(CT*(CT*(A(I,7)*CT+A(I,6))+A(I,5))+A(I,4))*CT*CT+A(I,1)
   SP=(PV+CT*(A(I,3)*CT+A(I,2)))*SP*CF
   PV=T(1)*E(1)+T(2)*D(2)+T(3)*D(3)
   PQ=ABS(SP)
   CO=COS(PV)
   SN=SIN(PV)
   COO=ABS(CO)
   SNN=ABS(SN)
   IF(COO-C.0001)810,810,811
810 CO=0.
811 IF(SNN-C.0001)812,812,813
812 SN=0.
813 TEST=100000.
   DO 801 I=1,19
   TEST=TEST/10.
   IF(PQ-TEST)801,800,800
801 CONTINUE
800 SK=SP*CO
   SW=-SP*SN
   SV(I)=SV(I)+SK
   SF(I)=SF(I)+SW
615 P3=P3+1.
616 P2=P2+1.
617 P1=P1+1.
   DO 803 I=1,20
   SR=SR+SV(I)
803 SI=SI+SF(I)
   CF=ABS(E)
   CF=SQR T(CF)
   SS=4.*3.1415927/10/(CF**L)
   SR=-SR*SS
   SI=-SI*SS
   IND=0
   P1=1.
   P2=0.
   P3=0.
   COEM=C.
   PMAX=C.

```



```

302 SS=0.
    SP=0.
    SSR=0.
    SSI=0.
    DO 835 I=1,20
    SV(I)=0.
835 SF(I)=0.
    IF(IND)301,93,301
301 LIM=2.*PMAX+1.
    P1=-PMAX
    DO 203 N=1,LIM
    P2=-PMAX
    DO 204 J=1,LIM
    P3=-PMAX
    DO 205 K=1,LIM
93 DO 87 I=1,3
87 T(I)=Q(1,I)*P1+Q(2,I)*P2+Q(3,I)*P3+D(I)
    COE=T(1)*T(1)+T(2)*T(2)+T(3)*T(3)
    IF(COE-0.001)205,205,900
900 COE=SQRT(COE)
    SP=COE**L
    IF(IND)201,154,201
201 IF(COE-COEM)321,321,205
C   CARACTERISTIQUES DE DIRECTION ESPACE DIRECT
C   DIRECTION SIGMA
321 CT=(T(1)+T(2))/(SQRT(2.)*COE)
    IF(M)994,998,994
994 ST=SQRT(ABS(1.-CT*CT))
    SP=SP*ST**M
998 IF(ABS(T(3))-0.0001)65,64,64
65 IF(ABS(T(1)-T(2))-0.0001)67,66,66
66 CF=3.1415927/2.
    GO TO 96
67 CF=0.
    GO TO 96
64 CF=(T(1)-T(2))/(T(3)*SQRT(2.))
    CF=ATAN(CF)
    IF(T(3))95,96,96
95 CF=CF+3.1415927
96 PV=M
    CF=COS(CF*PV)
    I=L*(L+1)/2+1+M
    PV=CT*(CT*(CT*(A(I,7)*CT+A(I,6))+A(I,5))+A(I,4))*CT*CT+A(I,1)
    SP=(PV+CT*(A(I,3)*CT+A(I,2)))*SP*CF
154 LL=2*L+2
    BETA=2./SQRT(ETA)
    RS=COE
    CA=C.
    B=CA+PAS
    Z=0.
110 IF(B-BETA)120,120,114
114 B=BETA

```



```

120 SJ=0.
    DO 130 I=1,5
    X=(CA+B)/2.+(B-CA)*U(I)/2.
    IF(X)122,130,122
122 AL=LL
    C=E*X*X/4.-R S*R S/X/X-AL*ALOG(X)
    IF(C+85.)130,130,123
123 SJ=SJ+EXP(C)*H(I)
130 CONTINUE
    Z=Z+SJ*(B-CA)/2.
    IF(B-BETA)140,145,145
140 CA=B
    E=B+PAS
    GO TO 110
145 SP=SP*2
    IF(IND)202,312,202
312 IF(SS+SP-SS)313,314,313
313 SS=SS+SP
    P1=P1+1.
    GO TO 93
314 IND=1
    PMAX=P1+2.
    COEM=COE
    GO TO 302
202 RK=XR(1)*(T(1)-D(1))+XR(2)*(T(2)-D(2))+XR(3)*(T(3)-D(3))
    CO=COS(RK)
    SN=SIN(RK)
    COO=ABS(CO)
    SNN=ABS(SN)
    IF(COO-0.0001)820,820,821
820 CO=0.
821 IF(SNN-0.0001)822,822,823
822 SN=0.
823 IF(L-L/2*2)151,150,151
150 PV=SP*CO
    SK=SP*SN
    LL=L/2
    GO TO 152
151 PV=SP*SN
    SK=-SP*CO
    LL=(L+1)/2
152 IF(LL-LL/2*2)153,310,153
153 PV=-PV
    SK=-SK
310 PQ=ABS(SP)
    TEST=100000.
    DO 832 I=1,19
    TEST=TEST/10.
    IF(PQ-TEST)832,833,833
832 CONTINUE
833 SV(I)=SV(I)+PV
    SF(I)=SF(I)+SK

```



```

205 P3=P3+1.
204 P2=P2+1.
203 P1=P1+1.
    DO 840 I=1,20
        SSR=SSR+SV(I)
840 SSI=SSI+SF(I)
        P1=ABS(E)
        P1=SQRT(P1)
        IND=-L
        LL=L+1
        SP=-2.
        SP=(SP**LL)*(P1**IND)/SQRT(3.1415927)
        SR=SR+SSR*SP
        SI=SI+SSI*SP
        WRITE(3,4)E,ETA,L,M,SR,SI
        SQ=1./SQRT(2.)
        E=E*100./(AA*AA)
        SR=SR*10./AA
        SI=SI*10./AA
        IF(L)1000,1500,1000
1000 IF(L/2*2-L)3000,3500,3000
3500 LL=L/2
        IF(LL/2*2-LL)4000,2000,4000
4000 SR=-SR
        SI=-SI
        GO TO 2000
3000 LL=(L+1)/2
        IF(LL/2*2-LL)5000,5500,5000
5500 BB=SR
        SR=SI
        SI=-BB
        GO TO 2000
5000 BB=SR
        SR=-SI
        SI=BB
2000 IF(M)2100,1500,2100
2100 MM=-M
        SR=SQ*SR
        SI=SQ*SI
        WRITE(2,3)SR,SI,L,MM,E
        SR=(-1.)**M*SR
        SI=(-1.)**M*SI
1500 WRITE(2,3)SR,SI,L,M,E
455 CONTINUE
    GO TO 25
1 FORMAT(I2)
2 FORMAT(3E14.0)
3 FORMAT(2E14.7,2I2,E14.7)
4 FORMAT(5H E = ,E15.8,7H ETA = ,E15.8,5H L = ,I2,5H M = ,
  1I2,6H SR = ,E15.8,6H SI = ,E15.8)
5 FORMAT(2I2)
6 FORMAT(E14.0)
7 FORMAT(3E14.0)
9 FORMAT(E14.0)
END

```


ANNEXE II

C

```

C      DERIVEE LOGARITHMIQUE ET TERME COMPLEMENTAIRE DU TERME DIAGONAL
      DIMENSION BS(10),BN(10),DB(10),DW(10),DL(10),TD(10)
      DIMENSION R(200),V(200),ZE(200)
      READ(1,8)PVD
      8 FORMAT(F10.0)
      200 READ(1,1)ZN,RM,NM,I1,JP
      1 FORMAT(2F10.0,3I2)
      READ(1,2)(R(I),V(I),I=I1,NM)
      2 FORMAT(2E15.0)
      DO 450 I=I1,NM
450  V(I)=V(I)+PVD
      FI=I1
      R(1)=R(I1)/FI
      DO 11 I=2,I1
      11 R(I)=R(I-1)+R(1)
      100 READ(1,3)E,ISU
      3 FORMAT(E14.0,I2)
      DO 400 NA=1,3
      8=NA-1
      ZE(I1)=-V(I1)*R(I1)/2.
      PE=(ZE(I1)-ZN)/R(I1)
      EA=E
      E=E+2.*PE
      A1=ZN/(B+1.)
      A2=(2.*ZN*ZN-E*(B+1.))/(2.*(B+1.)*(B+B+3.))
      A3=(E*ZN*(3.*B+4.)-2.*ZN**3)/(6.*(B+1.)*(B+2.)*(B+B+3.))
      A=1.-A1*R(1)+A2*R(1)*R(1)+A3*R(1)*R(1)*R(1)
      PSI=A*(R(1)**(B+1.))
      A=(R(1)**(B+1.))*{2.*A2*R(1)-A1+3.*A3*R(1)*R(1)}
      U=PSI*(B+1.)/R(1)+A
      E=BA
      PAS=R(2)-R(1)
      P=PAS*PAS/2.
      X=R(1)
      Y=R(1)+PAS/4.
      Z=R(1)+3.*PAS/4.
      S=R(1)+PAS/2.
      W=-2.*(ZN+PE*X)/X
      F=B*(B+1.)/X/X+W-E
      30 T1=P*F*PSI
      W=-2.*(ZN+PE*Y)/Y
      F=B*(B+1.)/Y/Y+W-E
      T2=P*F*(PSI*PAS*U/4.+T1/16.)
      W=-2.*(ZN+PE*Z)/Z
      F=B*(B+1.)/Z/Z+W-E
      T3=P*F*(PSI+3.*PAS*U/4.+T1/16.+T2/2.)
      W=-2.*(ZN+PE*S)/S

```



```

F=B*(B+1.)/S/S+W-E
T4=P*F*(PSI*PAS*U/2.+T1/36.+T2/6.+T3/18.)
X=X+PAS
Y=Y+PAS
Z=Z+PAS
S=S+PAS
W=-2.*{(ZN+PE*X)}/X
F=B*(B+1.)/X/X+W-E
T5=P*F*(PSI+PAS*U+8.*T1/21.+4.*T3/21.+9.*T4/21.)
PSI=PSI+PAS*U+(14.*T1+48.*T2+16.*T3+12.*T4)/90.
U=U+(7.*T1+32.*T2+32.*T3+12.*T4+7.*T5)/PAS/45.
IF(X-R(I1)+C.0001)30,50,50
50 I=I1
V(I1-1)=-2.*{(ZN+PE*R(I1-1))}/R(I1-1)
52 PAS=R(I+1)-R(I)
P=PAS*PAS/2.
K1=I-1
K2=I+2
GO 54 J=K1,K2
54 ZE(J)=-R(J)*V(J)/2.
X=R(I)
Y=R(I)+PAS/4.
Z=R(I)+3.*PAS/4.
S=R(I)+PAS/2.
F=B*(B+1.)/X/X+V(I)-E
T1=P*F*PSI
IND=C
KAK=C
T=Y
59 A1=(ZE(I)*(R(I+1)-T)-ZE(I+1)*(R(I)-T))/(R(I+1)-R(I))
A2=(ZE(I)*(R(I-1)-T)-ZE(I-1)*(R(I)-T))/(R(I-1)-R(I))
A3=(ZE(I)*(R(I+2)-T)-ZE(I+2)*(R(I)-T))/(R(I+2)-R(I))
A12=(A1*(R(I-1)-T)-A2*(R(I+1)-T))/(R(I-1)-R(I+1))
A13=(A1*(R(I+2)-T)-A3*(R(I+1)-T))/(R(I+2)-R(I+1))
Z1=(A12*(R(I+2)-T)-A13*(R(I-1)-T))/(R(I+2)-R(I-1))
W=-2.*Z1/T
F=B*(B+1.)/T/T+W-E
IF(IND)64,60,64
64 IF(KAK)66,65,66
60 T2=P*F*(PSI*PAS*U/4.+T1/16.)
IND=1
T=Z
GO TO 59
65 T3=P*F*(PSI+3.*PAS*U/4.+T1/16.+T2/2.)
KAK=1
T=S
GO TO 59
66 T4=P*F*(PSI+PAS*U/2.+T1/36.+T2/6.+T3/18.)
X=X+PAS
Y=Y+PAS
Z=Z+PAS
S=S+PAS

```



```

F=E*(B+1.)/X/X+V(I+1)-E
TS=P*F*(PSI+PAS*U+8.*T1/21.+4.*T3/21.+9.*T4/21.)
PSI=PSI+PAS*U+(14.*T1+48.*T2+16.*T3+12.*T4)/90.
U=U+(7.*T1+32.*T2+32.*T3+12.*T4+7.*T5)/PAS/45.
I=I+1
IF(R(I)-RM+C.CCC1)52,80,80
80 DL(NA)=U/PSI-1./RM
400 CONTINUE
WRITE(3,7)R(I)
7 FORMAT(2H ,E15.8)
WRITE(3,4)E,DL(1),DL(2),DL(3),JP
4 FORMAT(2H ,E15.8,2H ,3E15.8,2H ,I2)
C TERME DIAGONAL
LM=2
LM1=LM+1
IF(E)500,510,510
510 F=SQRT(E)
X=F*RM
BS(1)=SIN(X)/X
BS(2)=SIN(X)/(X*X)-COS(X)/X
BN(1)=-COS(X)/X
BN(2)=-COS(X)/(X*X)-BS(1)
DB(1)=-BN(1)-BS(1)/X
CW(1)=BS(1)-BN(1)/X
DE(2)=BS(1)-2.*BS(2)/X
CW(2)=BN(1)-2.*BN(2)/X
J=3
20 P=J-1
BS(J)=(2.*P-1.)*BS(J-1)/X-BN(J-2)
BN(J)=(2.*P-1.)*BN(J-1)/X-BN(J-2)
CB(J)=BS(J-1)-(P+1.)*BS(J)/X
CW(J)=BN(J-1)-(P+1.)*BN(J)/X
I=LM+1
IF(J-1)15,16,15
15 J=J+1
GO TO 20
16 DO 35 I=1,LM1
35 TD(1)=F*(F*CW(I)-BN(I)*DL(I))/(F*DB(I)-BS(I)*DL(I))
WRITE(2,5)TD(1),TD(2),TD(3),E,JP
5 FORMAT(4E15.8,I3)
WRITE(3,6)TD(1),TD(2),TD(3)
6 FORMAT(19H ,3E15.8)
GO TO 82
500 F=-E
F=SQRT(F)
X=F*RM
SH=(EXP(X)-EXP(-X))/2.
CH=(EXP(X)+EXP(-X))/2.
BS(1)=SH/X
BS(2)=-SH/(X*X)+CH/X
BN(1)=CH/X
BN(2)=CH/(X*X)-BS(1)
CB(1)=-BN(1)+BS(1)/X

```



```

DW(1)=BS(1)-BN(1)/X
DB(2)=BS(1)-2.*BS(2)/X
DW(2)=BN(1)+2.*BN(2)/X
J=3
70 P=J-1
   BS(J)=(2.*P-1.)*BS(J-1)/X-BS(J-2)
   BN(J)=-((2.*P-1.)*BN(J-1)/X+BN(J-2))
   DB(J)=BS(J-1)+(P+1.)*BS(J)/X
   DW(J)=BN(J-1)-(P+1.)*BN(J)/X
   P=J
   BS(J+1)=-((2.*P-1.)*BS(J)/X+BS(J-1))
   BN(J+1)=(2.*P-1.)*BN(J)/X-BN(J-1)
   DB(J+1)=BS(J)-(P+1.)*BS(J+1)/X
   DW(J+1)=BN(J)+(P+1.)*BN(J+1)/X
   IF(J-LM)75,76,76
75 J=J+2
   GO TO 70
76 DO 85 I=1,LM1,2
   TD(I)=-F*(F*DW(I)-BN(I)*DL(I))/(-F*DB(I)-BS(I)*DL(I))
85 TD(I+1)=F*(-F*DW(I+1)-BN(I+1)*DL(I+1))/(F*DB(I+1)-BS(I+1)*DL(I+1))
   WRITE(2,5)TD(1),TD(2),TD(3),E,JP
82 IF(1SU)200,100,200
   END

```


C

ANNEXE III

```

C      DETERMINANT
C      CALCUL DES COEFFICIENTS A
      DIMENSION FAC(21)
      DIMENSION LL2(135),MM2(135),LL1(135),MM1(135),JP1(135),JP2(135)
      DIMENSION CUE(2,7),D(14,13,3)
      DIMENSION TD(3,2)
      DIMENSION ATR(9,9,3),ATI(9,9,3),BR(6,6,4),BI(6,6,4)
      DIMENSION INDID(6),INDIN(6),JOK(6),JAK(6)
      DIMENSION ALPHR(9,6),ALPHI(9,6),DET(2),AD(24,12)
      DIMENSION P(2),PA(2),PZ(2),A(2)
      FAC(1)=0.
      DO 10 I=2,21
      PAP=I-1
10     FAC(I)=FAC(I-1)+ALOG(PAP)
      READ(1,1)NN,NT
      READ(1,2)(LL2(I),MM2(I),LL1(I),MM1(I),JP1(I),JP2(I),I=1,NT)
1000  READ(1,3)E
      DO 1502 I=1,11
      DO 1502 J=1,11
      DO 1502 K=1,3,2
1502  D(I,J,K)=C.
      DO 1500 K=1,13
      READ(1,4)CDR,CDI,L,M
      I=2*L+1
      J=L+M+1
      C(I,J,1)=CDR
1500  C(I+1,J,1)=CDI
      DO 1501 K=1,25
      READ(1,4)CDR,CDI,L,M
      I=2*L+1
      J=L+M+1
      C(I,J,3)=CDR
1501  C(I+1,J,3)=CDI
      READ(1,3)(TD(1,J),TD(2,J),TD(3,J),J=1,2)
      1 FORMAT(12,13)
      2 FORMAT(612)
      3 FORMAT(3E15.0)
      4 FORMAT(2E14.0,2I2)
C      CALCUL DES COEFFICIENTS DE WIGNER
      DO 1100 I=1,NT
      L2=LL2(I)
      L1=LL1(I)
      M2=MM2(I)
      M1=MM1(I)
      JP=JP1(I)
      JPP=JP2(I)
      IF(JP-JPP)110,105,110

```



```

105 JIK=JP
    GO TO 15C
110 JIK=3
150 LM=L1+L2
    L=L2-L1
    IF(L)40,41,41
40 L=-L
41 LP=L
    M=M2-M1
    N=M
    IF(N)60,61,61
60 N=-N
61 IF(L-N)70,15,15
70 L=L+2
    LP=L
    GO TO 61
15 K1=L1+L2-L+1
    K2=L2+L-L1+1
    K3=L+L1-L2+1
    K4=L1+L2+L+2
    DEL=FAC(K1)+FAC(K2)+FAC(K3)-FAC(K4)
    DEL=DEL/2.
    K=(L1+L2+L)/2
    K1=K+1
    K2=K-L1+1
    K3=K-L2+1
    K4=K-L+1
    RAC1=DEL+FAC(K1)-FAC(K2)-FAC(K3)-FAC(K4)
    RAC1=EXP(RAC1)
    K1=L1+M1+1
    K2=L1-M1+1
    K3=L2-M2+1
    K4=L2+M2+1
    K5=L+M+1
    K6=L-M+1
    RAC2=FAC(K1)+FAC(K2)+FAC(K3)+FAC(K4)+FAC(K5)+FAC(K6)
    RAC2=RAC2/2.+DEL
    INC=C
    S=0.
    SP=0.
    J=0
50 K1=L-L2+J+M1
    K2=L-L1+J+M2
    K3=L1+L2-L-J
    K4=L1-J-M1
    K5=L2-J-M2
    IF(K1)100,99,99
99 IF(K2)100,98,98
98 IF(K3)100,97,97
97 IF(K4)100,96,96
96 IF(K5)100,95,95
95 SP=FAC(J+1)+FAC(K1+1)+FAC(K2+1)+FAC(K3+1)+FAC(K4+1)+FAC(K5+1)

```



```

      SP=EXP(-SP)
      IF(J-J/2*2)94,93,94
94  SP=-SP
93  S=S+SP
      IND=1
      GO TO 102
100  IF(IND)101,102,101
102  J=J+1
      GO TO 50
101  COE(1,L+1)=S*EXP(RAC2)*RAC1
      A1=L1
      A2=L2
      AA=L
      S=(2.*A1+1.)*(2.*A2+1.)*(2.*AA+1.)/4./3.1415926
      COE(1,L+1)=COE(1,L+1)*SQRT(S)
      K=K+L1+M2-L2-M
      IF(K-K/2*2)200,201,200
200  COE(1,L+1)=-COE(1,L+1)
201  L=L+2
      IF(L-LM)15,15,203
203  LP=LP+1
      LM=LM+1
      A(1)=C.
      A(2)=C.
      DO 25 L=LP,LM,2
      J=2*(L-1)+1
      DO 71 K=1,J
      IF(M+(L-K))71,75,71
71  CONTINUE
75  PA(1)=COE(1,L)*D(J,K,J1K)
      PA(2)=COE(1,L)*D(J+1,K,J1K)
      IF(L-1)80,81,80
80  LL=L-1
      IF(LL-LL/2*2)82,83,82
82  PZ(1)=C.
      PZ(2)=(-1.)*((LL-1)/2+1)
      GO TO 42
83  PZ(1)=(-1.)*((LL/2)
      PZ(2)=0.
42  PAP=PA(1)
      PA(1)=PAP*PZ(1)-PA(2)*PZ(2)
      PA(2)=PA(2)*PZ(1)+PAP*PZ(2)
81  A(1)=A(1)+PA(1)
      A(2)=A(2)+PA(2)
25  CONTINUE
      L=L2-L1
      LL=IABS(L)
      IF(LL-LL/2*2)43,44,43
44  PZ(1)=(-1.)*((LL/2)
      PZ(2)=C.
      GO TO 47
43  PZ(1)=C.

```



```

      PZ(2)=[-1.)**(LL-1)/2)
      IF(L)45,47,47
45  PZ(2)=-PZ(2)
47  PAP=A(1)
      A(1)=PAP*PZ(1)-A(2)*PZ(2)
      A(2)=A(2)*PZ(1)+PAP*PZ(2)
29  A(1)=4.*3.1415926*A(1)
      A(2)=4.*3.1415926*A(2)
C   TRANSFORMATION DES INDICES DES COEFFICIENTS A
      LM=2*L2+1*M2+L2*(L2-1)
      LMP=2*L1+1*M1+L1*(L1-1)
      ATR(LM,LMP,JI K)=A(1)
      ATI(LM,LMP,JI K)=A(2)
      IF(JP-JPP)1100,210,1100
210  ATR(LMP,LM,JI K)=ATR(LM,LMP,JI K)
      ATI(LMP,LM,JI K)=-ATI(LM,LMP,JI K)
1100 CONTINUE
      ITEST=1
C   DIRECTION SIGMA
C   ENTREE DES CARACTERISTIQUES DE LA RI1
      LMAX=6
      IOR=1
      NDET=12
      JOK(1)=0
      JOK(2)=1
      JOK(3)=2
      JOK(4)=3
      JOK(5)=4
      JOK(6)=5
      JAK(1)=1
      JAK(2)=2
      JAK(3)=2
      JAK(4)=3
      JAK(5)=3
      JAK(6)=3
      INDIC(1)=1
      INDIC(2)=2
      INDIC(3)=2
      INDIC(4)=5
      INDIC(5)=5
      INDIC(6)=5
      INDIN(1)=1
      INDIN(2)=4
      INDIN(3)=4
      INDIN(4)=9
      INDIN(5)=9
      INDIN(6)=9
      DO 1601 I=1,9
      DO 1601 J=1,6
      ALPHR(I,J)=0.
1601  ALPHI(I,J)=0.
      SQ=1./SQRT(2.)

```



```

SQ1=SQRT(3.)/2.
ALPHR(1,1)=1.
ALPHR(2,2)=SQ
ALPHR(4,2)=-SQ
ALPHR(3,3)=1.
ALPHR(7,4)=SQ1
ALPHR(9,4)=SQ/2.
ALPHR(5,4)=SQ/2.
ALPHI(9,5)=-SQ
ALPHI(5,5)=SQ
ALPHR(7,6)=-1./2.
ALPHR(9,6)=SQ1*SQ
ALPHR(5,6)=SQ1*SQ
GO TO 111C

```

```

1105 ITEST=2
C   ENTREE DES CARACTERISTIQUES DE LA RI2

```

```

LMAX=3
IOR=1
NDET=6
JCK(1)=0
JLK(2)=1
JLK(3)=2
JAK(1)=2
JAK(2)=3
JAK(3)=3
INDIC(1)=2
INDIC(2)=5
INDIC(3)=5
INDIN(1)=4
INDIN(2)=5
INDIN(3)=9
DO 1600 I=1,9
DO 1600 J=1,6
ALPHR(I,J)=0.

```

```

1600 ALPHI(I,J)=0.
SQ=1./SQRT(2.)
ALPHI(4,1)=-SQ
ALPHI(2,1)=-SQ
ALPHI(8,2)=-SQ
ALPHI(6,2)=-SQ
ALPHI(9,3)=-SQ
ALPHI(5,3)=SQ

```

```

C   CALCUL DES COEFFICIENTS B

```

```

1110 DO 500 JIK=1,3,2
DO 500 LMU=1,LMAX
DO 500 LMUP=1,LMAX
IE1=INDIC(LMU)
ICP1=INDIN(LMU)
IC2=INDIC(LMUP)
ICP2=INDIN(LMUP)
BR(LMU,LMUP,JIK)=0.
BI(LMU,LMUP,JIK)=0.

```



```

      DO 600 LM=ID1, IDP1
      DO 600 LMP=ID2, IDP2
      BR(LMU,LMUP, JIK)=BR(LMU,LMUP, JIK)+ALPHR(LM,LMU)*ATR(LM,LMP, JIK)*AL
      KPHR(LMP,LMUP)+ALPHI(LM,LMU)*ATI(LM,LMP, JIK)*ALPHR(LMP,LMUP)+ALPHI(
      KLM,LMU)*ATR(LM,LMP, JIK)*ALPHI(LMP,LMUP)-ALPHR(LM,LMU)*ATI(LM,LMP, J
      KIK)*ALPHI(LMP,LMUP)
      BI(LMU,LMUP, JIK)=BI(LMU,LMUP, JIK)+ALPHR(LM,LMU)*ATR(LM,LMP, JIK)*AL
      KPHI(LMP,LMUP)+ALPHI(LM,LMU)*ATI(LM,LMP, JIK)*ALPHI(LMP,LMUP)+ALPHR(
      KLM,LMU)*ATI(LM,LMP, JIK)*ALPHR(LMP,LMUP)-ALPHI(LM,LMU)*ATR(LM,LMP, J
      KIK)*ALPHR(LMP,LMUP)
600 CONTINUE
      IF(JIK-1) 651, 650, 651
650 BR(LMU,LMUP, 2)=BR(LMU,LMUP, 1)
      BI(LMU,LMUP, 2)=BI(LMU,LMUP, 1)
      GO TO 500
651 BR(LMUP,LMU, 4)=BR(LMU,LMUP, 3)
      BI(LMUP,LMU, 4)=-BI(LMU,LMUP, 3)
500 CONTINUE
C  CALCUL DES ELEMENTS DU DETERMINANT
      DO 700 JIK=1, 4
      DO 700 LMU=1, LMAX
      DO 700 LMUP=1, LMAX
      IF((JIK-1)*(JIK-3)) 710, 715, 710
715 KI=LMU+JOK(LMU)
      GO TO 720
710 KI=LMU+JOK(LMU)+IOR
720 IF((JIK-1)*(JIK-4)) 730, 735, 730
735 J=LMUP+JOK(LMUP)
      GO TO 740
730 J=LMUP+JOK(LMUP)+IOR
740 IF(KI-J) 755, 750, 755
750 JJ=JAK(LMU)
      BR(LMU,LMUP, JIK)=BR(LMU,LMUP, JIK)+TD(JJ, JIK)
755 I=2*KI-1
      AD(I, J)=BR(LMU,LMUP, JIK)
      AD(I+1, J)=BI(LMU,LMUP, JIK)
700 CONTINUE
C  CALCUL DU DETERMINANT
      EPS=1.E-08
      N=NDET
      N2=2*N
      S=1.
      N1=N2-2
      DO 17 I=1, N1, 2
      J=(I+1)/2
      I1=I+2
      KR=I
      E=AD(I, J)**2+AD(I+1, J)**2
      DO 12 K=I1, N2, 2
      IF(AD(K, J)**2+AD(K+1, J)**2-B) 12, 12, 11
11 KR=K
      E=AD(K, J)**2+AD(K+1, J)**2

```



```

12 CONTINUE
   IF(AD(KR,J)**2+AD(KR+1,J)**2-EPS) 13,13,14
13 DET(1)=0.
   DET(2)=0.
   GO TO 1300
14 DO 15 K=J,N
   P(1)=AD(I,K)
   P(2)=AD(I+1,K)
   AD(I,K)=AD(KR,K)
   AD(I+1,K)=AD(KR+1,K)
   AD(KR,K)=P(1)
   AD(KR+1,K)=P(2)
19 CONTINUE
   IF(I-KR) 21, 20, 21
21 S=-S
20 J1=J+1
   DO 16 K=J1,N
   PAP=AD(I,K)
   B=AD(I,J)**2+AD(I+1,J)**2
   AD(I,K)=(PAP*AD(I,J)+AD(I+1,K)*AD(I+1,J))/B
   AD(I+1,K)=(AD(I,J)*AD(I+1,K)-PAP*AD(I+1,J))/B
16 CONTINUE
   DO 17 K=I1,N2,2
   DO 17 KR=J1,N
   AD(K,KR)=AD(K,KR)-AD(I,KR)*AD(K,J)+AD(I+1,KR)*AD(K+1,J)
   AD(K+1,KR)=AD(K+1,KR)-AD(K+1,J)*AD(I,KR)-AD(K,J)*AD(I+1,KR)
17 CONTINUE
   DET(1)=AD(1,1)
   DET(2)=AD(2,1)
   DO 18 I=3,N2,2
   J=(I+1)/2
   PAP=DET(1)
   DET(1)=PAP*AD(I,J)-DET(2)*AD(I+1,J)
   DET(2)=PAP*AD(I+1,J)+DET(2)*AD(I,J)
18 CONTINUE
   DET(1)=DET(1)*S
   DET(2)=DET(2)*S
1300 WRITE(3,1301)E, ITEST,DET(1),DET(2)
1301 FORMAT(5H E = ,E15.8,10H ITEST = ,I2,7H DR = ,E15.8,7H DI = ,
K5.8)
   IF( ITEST-1)1105,1105,1000
   END

```


B I B L I O G R A P H I E

- [1] W. KOHN et N. ROSTOKER, Phys. Rev. 94, 1111 (1954)
- [2] B. SEGALL, Phys. Rev., 105, 108 (1957)
- [3] F.S. HAM et B. SEGALL, Phys. Rev., 124 , 1786 (1961)
- [4] G.V. OZOLIN'SH, G.K. AVERKIEVA, N.A. GORYUNOVA et A.F.IEVIN'SH
Kritallgraphia, 8 , 272 (1963)
- [5] G.F. KOSTER, Solid State Physics, 5 , 173 (1957)
- [6] C. HERRING, Phys. Rev., 52, 361 (1937)
- [7] D.G. BELL, Rev. of Modern Phys., 26, 311 (1954)
- [8] P. EWALD, Ann. Phys., 64 , 253 (1921)
- [9] A. MESSIAH, Mécanique Quantique, Tome II, Dunod (1959)
- [10] E.V. CONDON et G.H. SHORTLEY, The Theory of Atomic Spectra,
Cambridge University Press, p. 175 (1951)
- [11] F. HERMAN et S. SKILLMAN, Atomic Structure Calculations, Prentice Hall
Inc., Englewood Cliffs, New-Jersey (1963)
- [12] F. HERMAN, Physique des Semiconducteurs, C.R. du 7° Cong. Internat. Paris,
Dunod (1964)
- [13] M. CARDONA, K.L. SHAKLEE, F.H. POLLAK, Phys.Rev., 154, 696 (1967)
- [14] E.O. KANE, J. Phys. Chem. Solids, 1, 249 (1957)
- [15] F. CESCHINO et J. KUNTZMANN, Problèmes différentiels de conditions
initiales , Dunod (1963)

- [16] A.K. RAMDAS et H.Y. FAN, Bull. Am. Phys. Soc., 3, 121 (1958)
- [17] A. SAGAR, Phys. Rev., 117, 93 (1960)
- [18] H.B. HARLAND et J.C. WOOLLEY, Cana. Jour.of Phys., 44, 2715 (1966)
- [19] B.B. KOSICKI, W. PAUL, A.J. STRAUSS et G.W. ISELER,
Phys. Rev. Lett., 17, 1175 (1966)
- [20] H. EHRENREICH, J. Appl. Phys., 32, 2155 (1961)
- [21] W. PAUL, J. Appl. Phys., 32, 2082 (1961)
- [22] F. HERMAN, R.L. KORTUM, C.D. KUGLIN et J.S. SHAY, Proc.of Internat.
Conf. on II.VI Semiconducting Compounds, Providence (1967)
- [23] M.L. COHEN et T.K. BERGSTRESSER, Phys. Rev., 141, 789 (1966)
- [24] H.I. ZHANG et J. CALLAWAY, Solid State Comm., 6, 515 (1968)
- [25] E.O. KANE, Semiconductors and Semimetals, Academic Press, vol.1, p.75 (1966)
- [26] R.A. STRADLING, Phys. Lett., 20, 217 (1966)
- [27] M. CARDONA, J. Phys. Chem. Solids, 24, 1543 (1963)
- [28] H. PILLER, J. Phys. Chem. Solids, 24, 425 (1963)
- [29] S. SANDROCK et J. TREUSCH, Phys. Stat. Sol., 16, 487 (1966)
- [30] K. MERTENS, Dissertation, Marburg (1967)
- [31] C.Y. LIANG, H. PILLER et D.L. STIERWALT, Appl. Phys. Letters, 12, 49 (1968)
- [32] C.Y. LIANG, J. Appl. Phys., 39, 3866 (1968)
- [33] W.M. BECKER, A.K. RAMDAS et H.Y. FAN, J. Appl. Phys., 33, 2094 (1961)
- [34] H.S. BENNET et E.A. STERN, Phys. Rev., 137, A 448 (1965)
- [35] H.J. STEPHEN et A.B. LIDIARD, J. Phys. Chem. Solids, 9, 43 (1959)

- [37] W. SHOCKLEY, Phys. Rev., 90 , 491 (1953)
- [38] J. HALPERN, B. LAX et Y. NISHINA, Phys. Rev., 134, A 140 (1964)
- [39] R.G. CHAMBERS, Proc. Phys. Soc., A 65, 903 (1952)
- [40] H. PILLER, J. Appl. Phys. 37, 763 (1966)

TABLE DES MATIERES

	page
CHAPITRE I - Introduction	1
 <u>Première partie</u>	
ETUDE THEORIQUE DE LA STRUCTURE DE BANDE DE L'ANTIMONIURE DE GALLIUM	4
CHAPITRE II - <u>Généralités sur la méthode de Kohn-Rostoker</u>	5
II.1- Principe de la méthode	5
II.2- Utilisation pratique de la méthode	8
II.3- Conclusion	14
CHAPITRE III - <u>Eléments de symétrie de l'antimoniure de gallium</u>	15
III.1- Structure, réseaux directs et réciproques	15
III.2- Groupe spatial de symétrie	16
III.3- Représentations irréductibles du groupe (simple) du vecteur $\vec{k}$	19
III.4- Effet du renversement du temps	21
III.5- Relations de compatibilité	22
III.6- Harmoniques du réseau	23
CHAPITRE IV - <u>Détermination des coefficients de structure</u>	26
IV.1- Propriétés caractéristiques des coefficients A et B	26
IV.2- Introduction des coefficients D	28
IV.3- Méthode de la double sommation d'Ewald	30
IV.4- Utilisation des symétries du cristal	33
IV.5- Programmation du calcul des coefficients D	37

CHAPITRE V	-	<u>Choix du potentiel et résolution de l'équation radiale</u>	38
V.1	-	Généralités sur le choix du potentiel	38
V.2	-	Choix du potentiel de départ $V_{mt}(r)$	39
V.3	-	Modification du potentiel de départ	43
V.4	-	Effet des termes à symétrie non sphérique du potentiel	49
V.5	-	Résolution de l'équation radiale	50
CHAPITRE VI	-	<u>Obtention du déterminant et calculs</u>	54
VI.1	-	Choix des fonctions compétitives	54
VI.2	-	Calculs	57
VI.3	-	Pratique du calcul	57
CHAPITRE VII	-	<u>Résultats sur la structure de bande du Ga Sb</u>	60
VII.1	-	Résultats	60
VII.2	-	Comparaison avec les données expérimentales	62
VII.3	-	Comparaison avec d'autres résultats théoriques	66
VII.4	-	Masses effectives	67
VII.5	-	Conclusion	73

Deuxième partie

ETUDE EXPERIMENTALE DE LA BANDE DE CONDUCTION DE L'ANTIMONIURE DE GALLIUM	75
--	----

CHAPITRE VIII	-	Rappels théoriques sur l'effet Faraday, la réflectivité infrarouge et l'effet Hall	78
VIII.1	-	Effet Faraday	78
VIII.2	-	Réflectivité - Résonance plasma	85
VIII.3	-	Effet Hall et conductivité	88

CHAPITRE IX	-	<u>Détails expérimentaux</u>	91
IX.1	-	Echantillons	91
IX.2	-	Effet Faraday	92
IX.3	-	Réflectivité	94
IX.4	-	Effet Hall et résistivité	94
CHAPITRE X	-	<u>Etude à 20°K du minimum en $k = 0$ de la bande de conduction</u>	95
X.1	-	Echantillon de type (p)	95
X.2	-	Echantillon de type (n)	97
CHAPITRE XI	-	<u>Etude du minimum (1,1,1) de la bande de conduction</u>	100
XI.1	-	Généralités	100
XI.2	-	Etude de deux échantillons de dopage différent	101
XI.3	-	Coefficient de température de $E_2 - E_1$	103
XI.4	-	Résultats expérimentaux	104
XI.5	-	Résultats	
		<u>Conclusion</u>	114
		Annexe I	117
		Annexe II	124
		Annexe III	128
		Bibliographie	135

DEUXIEME THESE

"PROPOSITION DONNEE PAR LA FACULTE "

Vu et permis d'imprimer
Montpellier, le
Le Doyen de la Faculté
des Sciences,

